

Министерство образования и науки РФ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский государственный педагогический университет»  
Институт математики, информатики и информационных технологий  
Кафедра высшей математики

**Построение корреляционной модели  
и прикладной анализ данных по термодинамическим  
свойствам оксидных керамик с кубической  
кристаллической структурой**

*Выпускная квалификационная работа по направлению  
01.03.02 «Прикладная математика и информатика»*

Квалификационная работа допу-  
щена к защите  
Зав. кафедрой

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2017 г.

\_\_\_\_\_

подпись

Руководитель ОПОП

\_\_\_\_\_

подпись

Исполнитель:

Ходарченко В.В.

обучающийся группы Б-42

\_\_\_\_\_

подпись

Научный руководитель:

Бодряков В. Ю.

Заведующий кафедрой высшей  
математики

\_\_\_\_\_

подпись

Екатеринбург  
2017

## Оглавление

Оглавление .....	2
Введение .....	3
ГЛАВА I. Описание исследуемых объектов. Этапы обработки статистических данных .....	6
1.1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ .....	6
1.2. ОПИСАНИЕ ИССЛЕДУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ BaO, SrO, MgAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> .....	7
1.3. ЭТАПЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ И ИСПОЛЬЗУЕМОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ .....	9
ГЛАВА II. Обработка и анализ данных .....	16
2.1. ПОИСК И ОБРАБОТКА ПЕРВОИСТОЧНИКОВ .....	16
2.2. АНАЛИЗ ДАННЫХ .....	21
Заключение .....	28
Библиографический список .....	30
Приложение 1. ....	37
Приложение 2. ....	38
Приложение 3. ....	43
Приложение 4. ....	46
Приложение 5. ....	52
Приложение 6. ....	54
Приложение 7. ....	57
Приложение 8. ....	58
Приложение 9. ....	62

## Введение

В настоящее время в мире происходит бурное развитие информационно-коммуникационных технологий. С каждым годом появляется всё больше мощных компьютеров, удобных гаджетов и прочих устройств. Применение информационно-коммуникационных технологий во всех сферах жизни стало нормой. Сфера образования, в том числе и высшего, не исключение. Информационно-коммуникационные технологии в образовании способствуют формированию и развитию целого ряда профессионально важных компетенций. Так, согласно ФГОС ВО по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» [28] у студентов должны быть сформированы следующие компетенции:

1. Способность использовать базовые знания естественных наук, математики и информатики, основные факты, концепции, принципы теорий, связанных с прикладной математикой и информатикой (ОПК-1);
2. Способность приобретать новые научные и профессиональные знания, используя современные образовательные и информационные технологии (ОПК-2);
3. Способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учётом основных требований информационной безопасности (ОПК-4);
4. Способность собирать, обрабатывать и интерпретировать данные современных научных исследований, необходимые для формирования выводов по соответствующим научным исследованиям (ПК-1).

При обучении студентов-прикладников, особое внимание следует уделить исследовательским компетенциям и владению современными ИКТ.

Бакалавры должны получить устойчивые профессиональные навыки поиска, обработки, анализа и интерпретации информации. Умение работать с большими объёмами данных необходимо для будущих специалистов. Формированию вышеуказанных компетенций и навыков способствует выполнение научно-исследовательской работы.

Целью настоящей выпускной квалификационной работы является формирование и развитие профессиональных и общепрофессиональных компетенций, на примере выполнения исследования по прикладному анализу теплофизических свойств оксидных керамик.

Для исследования были выбраны оксидные керамики с кубической кристаллической структурой, а именно оксид стронция ( $\text{SrO}$ ), смешанный оксид магния и алюминия ( $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ), оксид бария ( $\text{BaO}$ ). Оксидные керамики имеют широкий спектр применения в промышленной, высокотехнологической и научной сферах деятельности. Для разработки и создания современных высокотехнологичных материалов на основе оксидных керамик необходимы достаточно точные количественные сведения о теплофизических свойствах вещества, к числу которых относятся теплоемкость и тепловое расширение.

В ходе исследования решались следующие задачи:

1. Поиск первичных источников данных по молярной теплоемкости  $C(T)$  и объёмному коэффициенту теплового расширения  $\beta(T)$ ;
2. Построение первичных температурных зависимостей молярной теплоемкости и коэффициента объёмного теплового расширения на основе найденных данных;
3. Анализ и обработка собранных данных (построение сглаживающих трендов  $C(T)$ ,  $\beta(T)$ );
4. Анализ корреляционной зависимости  $\beta(C)$ ;
5. Формулирование содержательных выводов по результатам исследования.

При решении вышеуказанных задач использовались современные информационно-коммуникационные технологии. В частности пакеты прикладных программ Microsoft Office (Word, Excel), ресурсы сети интернет и электронные библиотеки.

Гипотеза исследования: между температурными зависимостями теплоемкости  $C(T)$  и объемного коэффициента теплового расширения  $\beta(T)$  исследуемых оксидных керамик с кубической кристаллической структурой, существует выраженная корреляционная зависимость  $\beta(T)$  вплоть до температур плавления тел  $T_m$ . Причем, эта корреляционная зависимость  $\beta(C)$  «билинейна» с изломом вверх, приходящемся на температуру, порядка температуры Дебая  $\theta$  и при достижении теплоемкостью своего классического предела Дюланга – Пти. Основанием для выдвижения гипотезы являются предшествующие исследования руководителя [2-13, 27, 33, 35], и совместные с руководителем публикации автора настоящей выпускной квалификационной работы [1].

# ГЛАВА I. Описание исследуемых объектов. Этапы обработки статистических данных

## 1.1. Основные понятия

Молярная теплоёмкость – физическая величина, численно равная количеству теплоты, которое необходимо передать одному молю (данного) вещества для того, чтобы его температура изменилась на единицу.

Формула расчета молярной теплоёмкости:

$$C(T) = \frac{Q}{\nu \Delta T},$$

где  $C(T)$  – молярная теплоёмкость ( $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ),  $Q$  – количество теплоты, полученное веществом при нагреве,  $\nu$  – количество вещества в нагреваемом (охлаждающемся) образце,  $\Delta T$  – разность конечной и начальной температур [24].

Коэффициент теплового расширения (КТР) – физическая величина, характеризующая относительное изменение объёма или линейных размеров тела с увеличением температуры на 1 К при постоянном давлении. Имеет размерность обратной температуры. Различают коэффициенты объёмного и линейного теплового расширения.

Коэффициент объёмного теплового расширения (КОТР) – относительное изменение объёма тела, происходящее вследствие изменения его температуры на 1 К при постоянном давлении. Формула для расчёта КОТР:

$$\beta(T) = \frac{1}{V} \left( \frac{\delta V}{\delta T} \right),$$

где  $\beta(T)$  – КОТР ( $10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ),  $V$  – молярный объём ( $\text{см}^3 \cdot \text{моль}^{-1}$ ),  $T$  – температура (К) [20].

Коэффициент линейного теплового расширения (КЛТР) – относительное изменение линейных размеров тела, происходящее в результате изменения его температуры на 1 К при постоянном давлении. Формула для расчета КЛТР:

$$\alpha(T) = \frac{1}{L} \left( \frac{\delta L}{\delta T} \right),$$

где  $\alpha(T)$  – КЛТР ( $10^{-6} \cdot \text{K}^{-1}$ ).

Коэффициент объёмного теплового расширения для кубических структур может быть найден как утроенный коэффициент линейного теплового расширения:

$$\beta(T) = 3 \cdot \alpha(T).$$

Корреляция, корреляционная зависимость – статистическая взаимосвязь двух или более случайных величин (либо величин, которые можно с некоторой допустимой степенью точности считать таковыми). При этом изменения значений одной или нескольких из этих величин сопутствуют систематическому изменению значений другой или других величин. Математической мерой корреляции двух случайных величин обычно служит квадрат коэффициента линейной корреляции  $R^2$  [20].

Линия тренда – инструмент в техническом анализе, предназначенный для определения направления движения тренда, идентификации участков замедления, изменения направления и разворота. Трендовая линия помогает определять тип тренда, сильный или слабый тренд [23].

## **1.2. Описание исследуемых объектов BaO, SrO, MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>**

Оксид бария – соединение бария с кислородом, имеющее химическую формулу BaO. Является основным оксидом. При стандартных условиях представляет собой бесцветные кристаллы с кубической решёткой (рис. 1) [25].

Оксид бария применяется для варки специального сорта стекла — применяемого для покрытия урановых стержней. Поскольку работа выхода оксида бария низка, то при невысокой стоимости и технологичности он давно и широко применяется для покрытия катодов различных электронно-вакуумных приборов, телевизионных, осциллографических трубках и другие [18]. Также используется для производства некоторых видов стекла, напри-

мер, оптического. В некоторых реакциях используется как катализатор. Яркость поверхности, покрытой оксидом бария, принимается за единицу при измерениях коэффициента яркости других поверхностей. Оксид бария используется в мощных медноокисных аккумуляторах в качестве компонента активной массы (окись бария-окись меди) [25]. В настоящее время ВаО широко используется как водоотнимающее средство, для получения пероксида бария и изготовления керамических магнитов из феррата бария (для этого смесь порошков оксидов бария и железа спекают под прессом в сильном магнитном поле) [25]. ВаО является одним из главных компонентов классических высокотемпературных сверхпроводников типа  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  [21].

Оксид стронция – основной оксид, имеющий химическую формулу  $\text{SrO}$ . Получают прокаливанием карбоната стронция при температуре около  $1400^\circ\text{C}$ . Оксид стронция представляет собой бесцветные кристаллы с кубической решеткой типа  $\text{NaCl}$  (рис. 1) [26].

Оксид стронция применяется в строительной и стекольной промышленности. Используется для получения эмалей [26]. Его применяют как исходное вещество для получения металлического стронция. Благодаря способности поглощать рентгеновское излучение  $\text{SrO}$  входит в состав стекла кинескопов цветных телевизоров. Также  $\text{SrO}$  входит в состав пиротехнических смесей и высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) [21].

Смешанный оксид магния и алюминия (шпинель) – редкий минерал кубической сингонии (рис. 1), имеющий химическую формулу  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ . По химическому составу — алюминат магния. Чистая шпинель бесцветна и водно-прозрачна, однако в природе такие камни встречаются очень редко. Гораздо чаще кристаллы бывают окрашены минеральными примесями в различные цвета: бурый, чёрный, розовый, красный, синий, благодаря чему имеет широкое применение в ювелирном деле [30].

Особое внимание стоит обратить на перспективы применения алюминомагнетовой шпинели в изготовлении оптически прозрачных керамических материалов. Оптическая керамика из шпинели представляет собой материал



с исключительными механической прочностью, износостойкостью на истирание, эрозионной стойкостью, устойчивостью к одностороннему аэродинамическому удару, химической инертностью; материал механически стабилен до температуры 1250 °С (до 1500 °С при кратковременном воздействии) [22], характеризуется прозрачностью в широком спектральном диапазоне (от ультрафиолетовой (УФ) до инфракрасной (ИК) области спектра). Она может применяться для изготовления обтекателей авиационной и ракетно-космической техники, защитных окон, линз летательных аппаратов, средств индивидуальной бронезащиты [22].

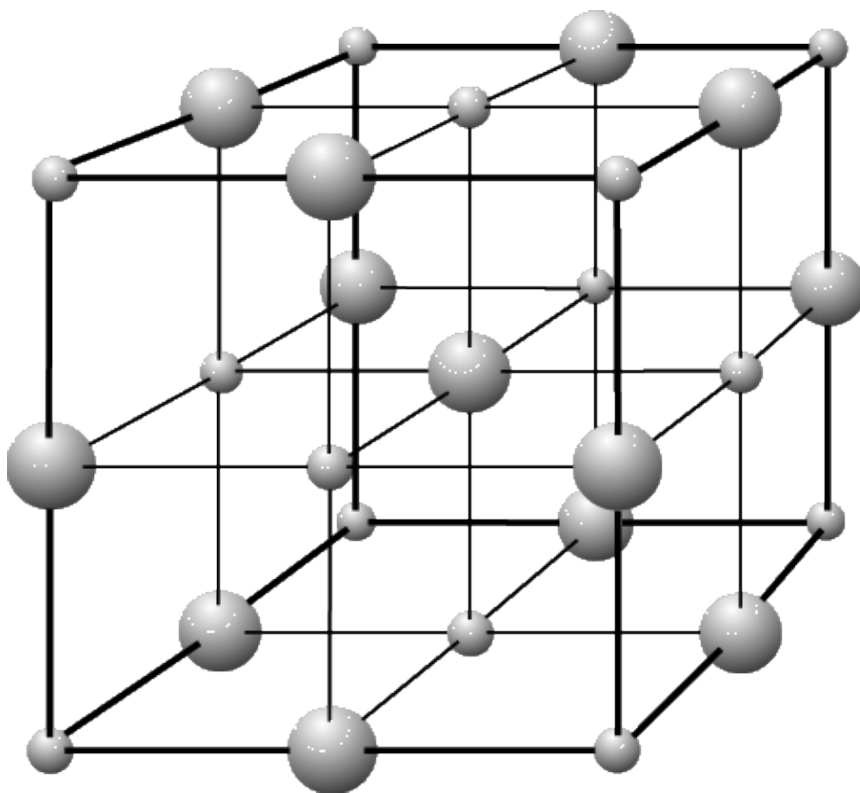


Рис. 1. Кубическая структура типа NaCl

### **1.3. Этапы обработки информации и используемое программное обеспечение**

Основным инструментом обработки и анализа статистических данных по термодинамическим свойствам исследуемых оксидных керамик  $\text{SrO}$ ,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  и  $\text{BaO}$  был выбран электронный табличный редактор Microsoft Of-

Microsoft Excel, входящий в пакет прикладных программ Microsoft Office. Microsoft Office Excel – программа для работы с электронными таблицами, созданная корпорацией Microsoft. Excel одно из наиболее популярных приложений в мире. Выбор данного программного продукта был сделан благодаря его удобству и сравнительной простоте в использовании. В данной выпускной квалификационной работе не будем углубляться в подробное описание вычислительных возможностей и деталей работы с Microsoft Office Excel (подробную информацию можно легко найти во встроенной справке и в руководствах [14]). Рассмотрим основные этапы обработки статистических данных по теплоёмкости и объёмному коэффициенту теплового расширения в табличном редакторе, соответствующим задачам по построению первичных температурных зависимостей указанных свойств, и их дальнейшему анализу и обработке.

Проиллюстрировать этапы и методы обработки статистических данных удобно на модельном объекте – оксиде алюминия  $Al_2O_3$ .

Оксид алюминия как минерал, называется корунд. В природе можно встретить только тригональную  $\alpha$ -модификацию оксида алюминия в виде минерала. Крупные прозрачные кристаллы корунда используются как драгоценные камни. Корунд применяется как огнеупорный материал. Керамика на основе оксида алюминия обладает высокой твёрдостью, огнеупорностью и антифрикционными свойствами, а также является хорошим изолятором. Она используется в горелках газоразрядных ламп, подложек интегральных схем, в запорных элементах керамических трубопроводных кранов, в зубных протезах и т. д. Исследование корреляционной зависимости теплоёмкости и объёмного коэффициента теплового расширения оксида алюминия приведено в работе научного руководителя и опубликовано [9]. В ходе исследования для корунда подтверждена гипотеза о наличии выраженной корреляционной зависимости между теплоемкостью  $C(T)$  и объемным коэффициентом теплового расширения  $\beta(T)$ , причём эта корреляционная зависимость  $\beta(C)$  «билинейна» с изломом вверх, приходящемся на температуру, порядка темпера-

туры Дебая  $\theta$  (~950 K) и при достижении теплоемкостью своего классического предела  $5 \cdot 3R$  Дюланга – Пти (рис. 2).

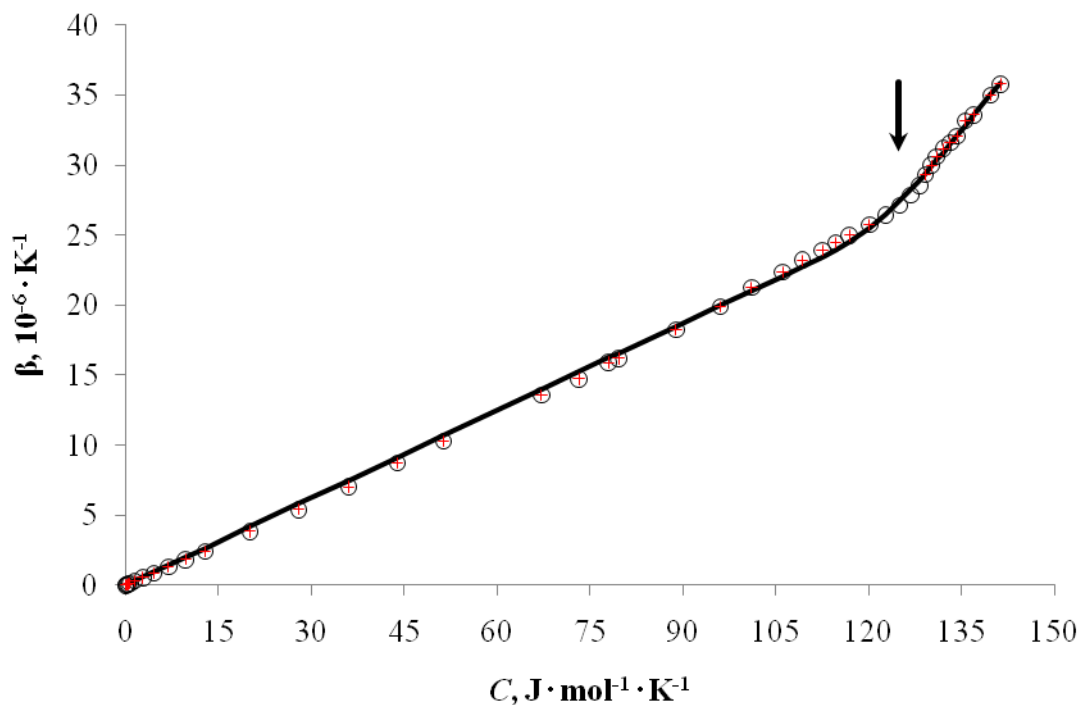


Рис. 2. Корреляционная зависимость КОТР и теплоёмкости  $\beta(C)$  оксида алюминия. Приведены сглаженные значения КОТР и теплоёмкости; сплошная линия – линия уравнений би-лейной модели. Области линейности маркированы крестиками. Стрелка маркирует классический предел  $5 \cdot 3 R$  Дюлонга-Пти для теплоёмкости.

После решения задачи по поиску первоисточников по теплоёмкости и коэффициенту объёмного теплового расширения для исследуемого объекта найденные данные заносятся в таблицы редактора Excel для каждого из указанных свойств. Таким образом, получается несколько таблиц содержащие сведения о температуре и соответствующих ей значений теплоёмкости и таблицы со сведениями о температуре и соответствующих ей значениях объёмного коэффициента теплового расширения. Назовём такие таблицы «таблицами первоисточников». При необходимости данные в таблицах первоисточников приводятся к принятым в СИ единицам измерения.

Следующим этапом является построение первичных температурных зависимостей для теплоёмкости  $C(T)$  и объёмного коэффициента теплового расширения  $\beta(T)$ , по которым можно судить как данные из разных первоис-

точников согласуются между собой. Первичные температурные зависимости строятся на основе таблиц первоисточников.

Далее идёт построение сглаживающих трендов  $C(T)$  и  $\beta(T)$ . Для теплоёмкости строится общая таблица, содержащая данные из всех её таблиц первоисточников. Данные в общей таблице упорядочиваются по возрастанию температуры. Выбирается шаг температуры, от 0 до 300 К шаг в 10 градусов, далее шаг в 50 (или 100) градусов вплоть до температуры плавления. Размер шага выбирается в зависимости от сведений в первоисточниках. Строится новая таблица с температурой с определённым шагом. Назовём такую таблицу «таблицей трендовых значений». Соответствующие температуре значения теплоёмкости вычисляются несколькими способами:

1. Если для одного значения температуры имеется одно значение теплоёмкости, т. е. сведения только из одного первоисточника, то берётся имеющееся значение теплоёмкости.
2. Если для одного значению температуры соответствует несколько значений теплоёмкости (из разных таблиц первоисточников), то берётся среднее арифметическое этих значений.
3. Если для значения температуры не содержатся соответствующих значений теплоёмкости ни в одном из найденных первоисточников, то его можно найти методами аппроксимации данных, линейной интерполяции.

На основе таблицы трендовых значений строится тренд  $C(T)$ . Аналогично строится тренд  $\beta(T)$  для объёмного коэффициента теплового расширения исследуемого объекта.

Завершительным этапом обработки данных является корреляционный анализ изучаемых свойств объекта. Корреляционный анализ – метод обработки статистических данных, посредством которого измеряется теснота связи между двумя или более величинами. В качестве меры тесноты корреляционной связи используется квадрат коэффициента линейной корреляции  $R^2$ .

На основе таблиц трендовых значений теплоёмкости  $C(T)$  и коэффициента объёмного теплового расширения  $\beta(T)$  строится общая таблица, в которой по температуре соотносятся трендовые значения указанных свойств. По общей таблице строится зависимость  $\beta(C)$ , для которой встроенными средствами Microsoft Office Excel вычисляется квадрат коэффициента линейной корреляции  $R^2$ . Чем ближе к единице значение  $R^2$ , тем теснее корреляционная связь.

Для модельного объекта  $Al_2O_3$  коэффициент корреляции имеет значение  $R^2=0,998$ . Таким образом, подтверждается первая часть гипотезы о наличии корреляционной зависимости  $\beta(C)$  между теплоемкостью  $C(T)$  и объёмным коэффициентом теплового расширения  $\beta(T)$ . Теперь обратим внимание на вторую часть гипотезы о характере корреляционной зависимости  $\beta(C)$ . Для удобства сформулируем вспомогательную гипотезу: эмпирические данные  $y_i(x_i)$  ( $i = 1, 2, \dots n$ ) соответствуют би-линейной теоретической модели (B-model)  $Y(X)$ :

$$(1) \quad Y(X) = \begin{cases} k_I \cdot X, & \text{в области I: } X \leq X_I; \\ a \cdot X^2 + b \cdot X + c, & \text{в области II: } X_I < X < X_{II}; \\ k_{II} \cdot X + d, & \text{в области III: } X_{II} \leq X. \end{cases}$$

В качестве эмпирических данных берутся значения из общей таблицы корреляционной зависимости  $\beta(C)$ , значения  $x_i$  – значения теплоёмкости  $C(T)$ , а значения  $y_i$  – значения объёмного коэффициента теплового расширения  $\beta(T)$ .

Условия гладкой «сшивки» на границах сопряжения областей I, II, III:

$$(2) \quad \begin{aligned} \text{На границе } X = X_I: \quad & Y_I(X_I) = Y_{II}(X_I); \\ & Y_I'(X_I) = Y_{II}'(X_I); \\ \text{На границе } X = X_{II}: \quad & Y_{II}(X_{II}) = Y_{III}(X_{II}); \\ & Y_{II}'(X_{II}) = Y_{III}'(X_{II}). \end{aligned}$$

Поясним модель. Говоря на «естественном» языке, теоретическая модель  $Y(X)$  (1) представляет собой два линейных участка (области I, III), глад-

ко сопряженных квадратичной переходной областью II. Модельная прямая в области I проходит через ноль. Формально модель содержит 8 свободных параметров, а именно,  $\{X_I, X_{II}, k_I, a, b, c, k_{II}, d\}$ . Четыре условия сшивки (2) уменьшают количество свободных параметров до 4-х, например,  $\{X_I, X_{II}, k_I, k_{II}\}$ . Назовем их базовыми варьируемыми параметрами (BVP). Остальные параметры выражаются после несложных преобразований через BVP путем реализации условий сшивки (2):

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2} \frac{k_{II} - k_I}{X_{II} - X_I}; \\ b &= \frac{k_I X_{II} - k_{II} X_I}{X_{II} - X_I}; \\ c &= \frac{1}{2} \frac{(k_{II} - k_I) \cdot X_I^2}{X_{II} - X_I}; \\ d &= -\frac{1}{2} (k_{II} - k_I) (X_{II} + X_I). \end{aligned}$$

Определение BVP модели (1) осуществляется методом наименьших квадратов (least squares method, LSM). А именно, варьируя BVP  $\{X_I, X_{II}, k_I, k_{II}\}$  до достижения наименьшей величины остаточной суммы квадратов:

$$\Phi(X_I, X_{II}, k_I, k_{II}) = \sum_{i=1}^n (y_i(x_i) - Y_i(x_i))^2 \rightarrow \min.$$

Приравнивая нулю частные производные  $(\partial\Phi/\partial X_I)$ ,  $(\partial\Phi/\partial X_{II})$ ,  $(\partial\Phi/\partial k_I)$ ,  $(\partial\Phi/\partial k_{II})$ , можно получить систему уравнений относительно BVP  $\{X_I, X_{II}, k_I, k_{II}\}$ , имеющую точное решение. Однако проще численно найти оптимальные значения  $\{X_I, X_{II}, k_I, k_{II}\}_{\min}$ , реализующие минимальную величину  $\Phi(X_I, X_{II}, k_I, k_{II}) = \Phi_{\min}$ . Такие вычисления осуществляются с помощью процедуры «Поиск решения» в MS Excel.

В целом качество описания би-линейной моделью (1) эмпирических данных контролируется визуально и по величине остаточной суммы квадратов  $\Phi_{\min}$ . Качество описания линейных участков (области I, III) может быть дополнительно проконтролировано с использованием встроенных процедур MS Excel.

По выше указанным формулам для модельного объекта оксида алюминия с использованием встроенных средств MS Excel была получена следующая система уравнений:

$$Y(X) = \begin{cases} 0,208 \cdot X, & \text{I: } X \leq 112,43; \\ 0,009 \cdot X^2 - 1,809 \cdot X + 113,414, & \text{II: } 112,43 < X < 130,83; \\ 0,538 \cdot X - 40,160, & \text{III: } 130,83 \leq X. \end{cases}$$

Таким образом, корреляционная зависимость  $\beta(C)$  «би-линейна» с изломом вверх, приходящемся на температуру, порядка температуры Дебая  $\theta$  (~950 K) и при достижении теплоемкостью своего классического предела  $5 \cdot 3R$  Дюланга – Пти ( 124,71 J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>).

## ГЛАВА II. Обработка и анализ данных

### 2.1. Поиск и обработка первоисточников

Поиск информации осуществлялся с использованием информационно-коммуникационных технологий, а именно с помощью интернета и электронных библиотек. В частности, были задействованы ресурсы: google.ru, scholar.google.ru, library.uspu.ru.

Для теплоёмкости  $C(T)$  SrO (рис. 3) было найдено шестнадцать первоисточников [15, 17, 29, 37-39, 41, 44-48, 51, 55-57], из которых 3 – российских авторов и 13 – зарубежных. Работы были выполнены в период с 1935–2012 гг. (табл. 2). Данные различных авторов незначительно расходятся между собой, что не оказывает существенного влияния на результат. Для построения сглаживающего тренда во внимание были приняты данные всех первоисточников, без исключения.

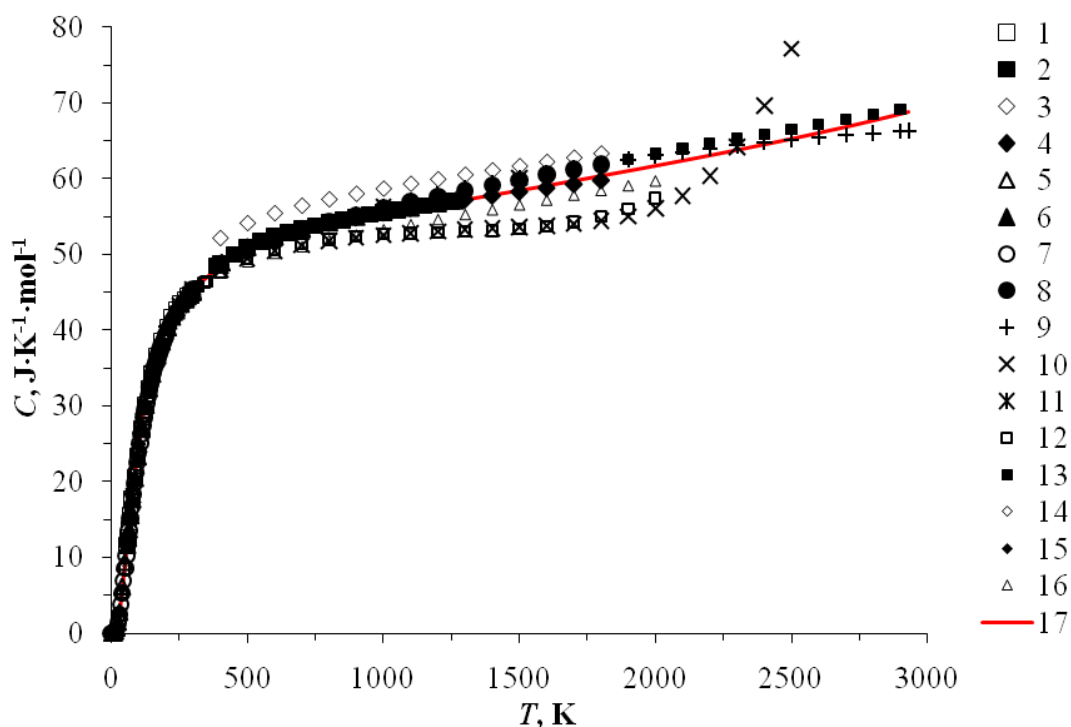


Рис. 3. Температурная зависимость теплоёмкости  $C(T)$  оксида стронция. Символы – первичные данные разных авторов: 1 – [15], 2 – [17], 3 – [29], 4 – [37], 5 – [38], 6 – [39], 7 – [41], 8 – [44], 9 – [45], 10 – [46], 11 – [47], 12 – [48], 13 – [51], 14 – [55], 15 – [56], 16 – [57]; сплошная линия – тренд.



Для коэффициента теплового расширения  $\beta(T)$  SrO (рис. 4) было найдено восемь первоисточников [29, 31, 32, 45, 49, 50, 53, 58]. Один из них принадлежит российским авторам, остальные – зарубежным. Работы были выполнены в период с 1957 – 2012 гг. (табл. 6). В области низких температур сильных расхождений нет, выше 300 К заметно несоответствие в данных различных авторов. Убедительного объяснения причинам расхождений в величине коэффициента объёмного теплового расширения оксида стронция так и не было найдено. Для проведения линии тренда были использованы все первоисточники.

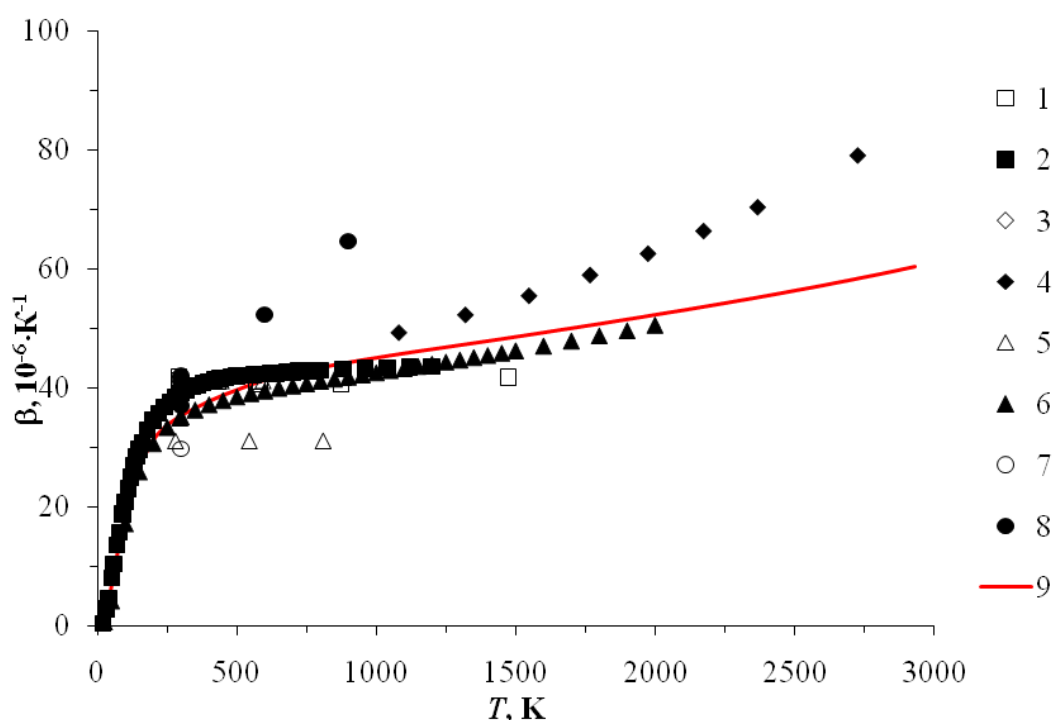


Рис. 4. Температурная зависимость коэффициента теплового объёмного расширения  $\beta(T)$  оксида стронция. Символы – табличные данные разных авторов: 1 – [29], 2 – [31], 3 – [32], 4 – [45], 5 – [49], 6 – [50], 7 – [53], 8 – [58]; сплошная линия – тренд.

По теплоёмкости  $C(T)$   $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  (рис. 5) было найдено 3 первоисточника, все зарубежных авторов, два из которых [35, 42] содержат достаточно подробные данные измерений для низких температур. Третьим первоисточником [36] является справочник, содержащий усреднённые данные других авторов. Работы были выполнены в период с 1985 по 2006 гг. Найденные

данные хорошо согласуются между собой. Для построения тренда  $\beta(T)$  были использованы сведения из всех трёх первоисточников.

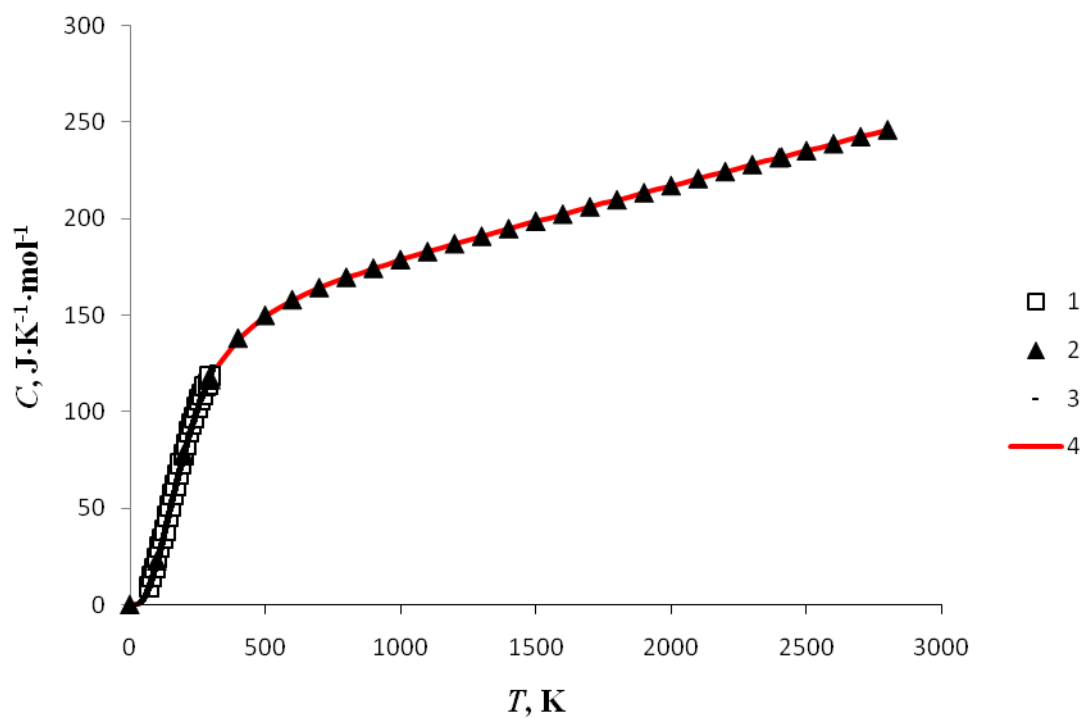


Рис. 5. Температурная теплоёмкости  $C(T)$  смешанного оксида магния и алюминия. Символы – табличные данные разных авторов: 1 – [35], 2 – [36], 3 – [42], сплошная линия – тренд.

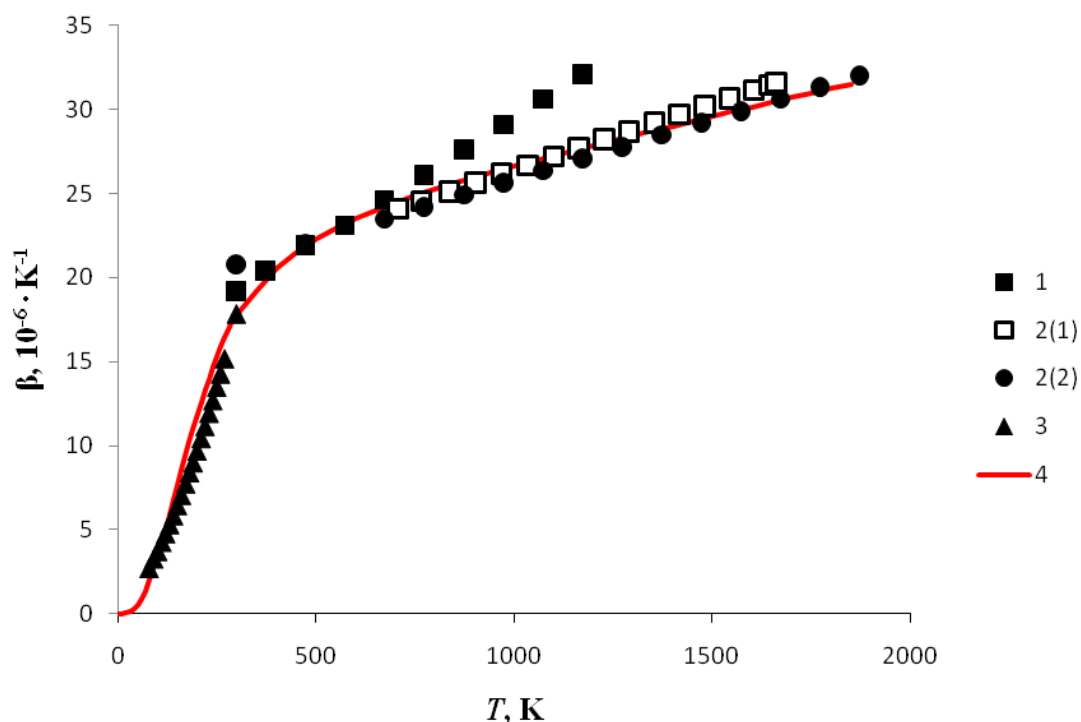


Рис. 6. Температурная зависимость коэффициента теплового объемного расширения  $\beta(T)$  смешанного оксида магния и алюминия. Символы – табличные данные разных авторов: 1 – [19], 2 – [52], 3 – [40]; сплошная линия – тренд.

По коэффициенту теплового расширения  $\beta(T)$   $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  (рис. 6) было найдено 3 первоисточника [19, 40, 52] среди которых только один российских авторов, остальные принадлежат зарубежным авторам. Работы были выполнены в период с 1992 по 2012 гг. Только один первоисточник содержит данные для низких температур [40]. При расчётах и построения тренда  $C(T)$  во внимание были приняты все три найденных первоисточника.

По теплоемкости  $C(T)$  для  $\text{BaO}$  (рис. 7) было найдено тринадцать первоисточников [15, 18, 29, 38, 39, 41, 44–46, 54–56]. Из них 3 – российских авторов и остальные – зарубежных. Работы были выполнены в период с 1935 – 1999 гг. (табл. 3). Данные по теплоёмкости имеют расхождения лишь для двух первоисточников: российских исследователей и шведских исследователей. Линия тренда построена с незначительным учетом этих данных (данные учитывались, но с меньшим весом).

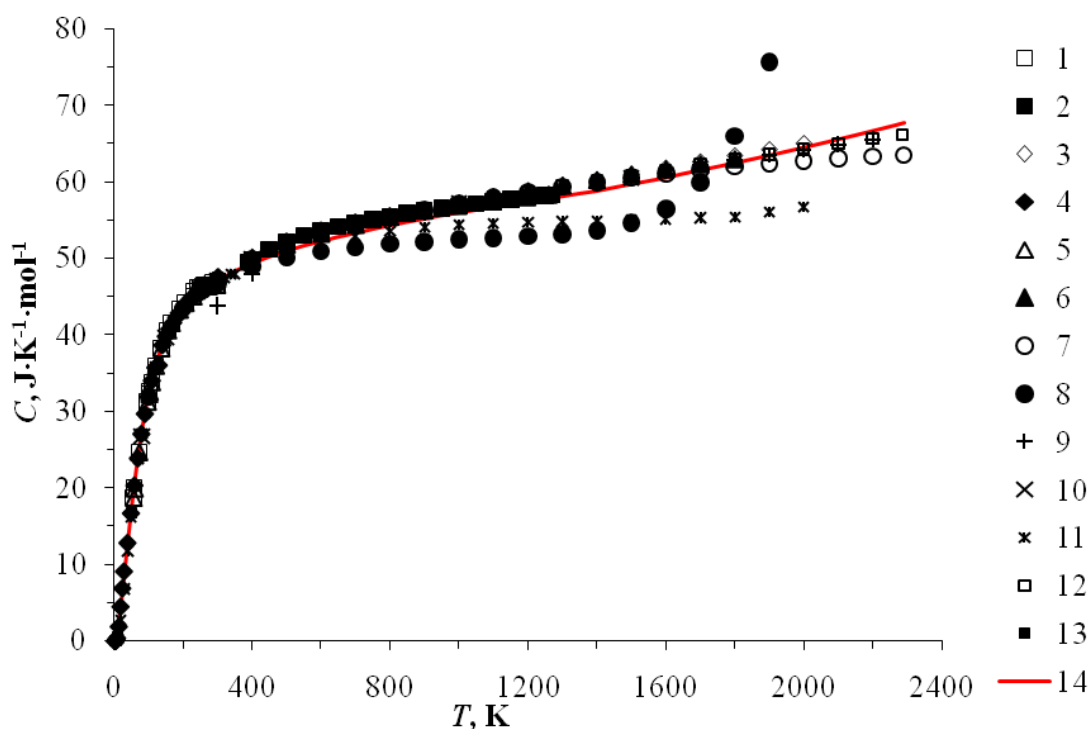


Рис. 7. Температурная зависимость теплоёмкости  $C(T)$  оксида бария. Символы – первичные данные разных авторов: 1 – [15], 2 – [18], 3 – [29], 4 – [38], 5 – [39], 6 – [41], 7 – [44], 8 – [45], 9 – [46], 10 – [54], 11 – [55], 12 – [56], 13 – [56]; сплошная линия – тренд.

По коэффициенту теплового расширения  $\beta(T)$  ВаО (рис. 8) было найдено всего 3 первоисточника [43, 49, 58], принадлежащих исключительно зарубежным исследователям. Такое небольшое количество данных ещё раз подчёркивает то, как мало изучены теплофизические свойства оксидных керамик, особенно коэффициента теплового расширения, и это, несомненно, ограничивает их применение. Работы были выполнены в период 1979 – 2003 гг. (табл. 7). Для построения линии тренда учтены все первоисточники.

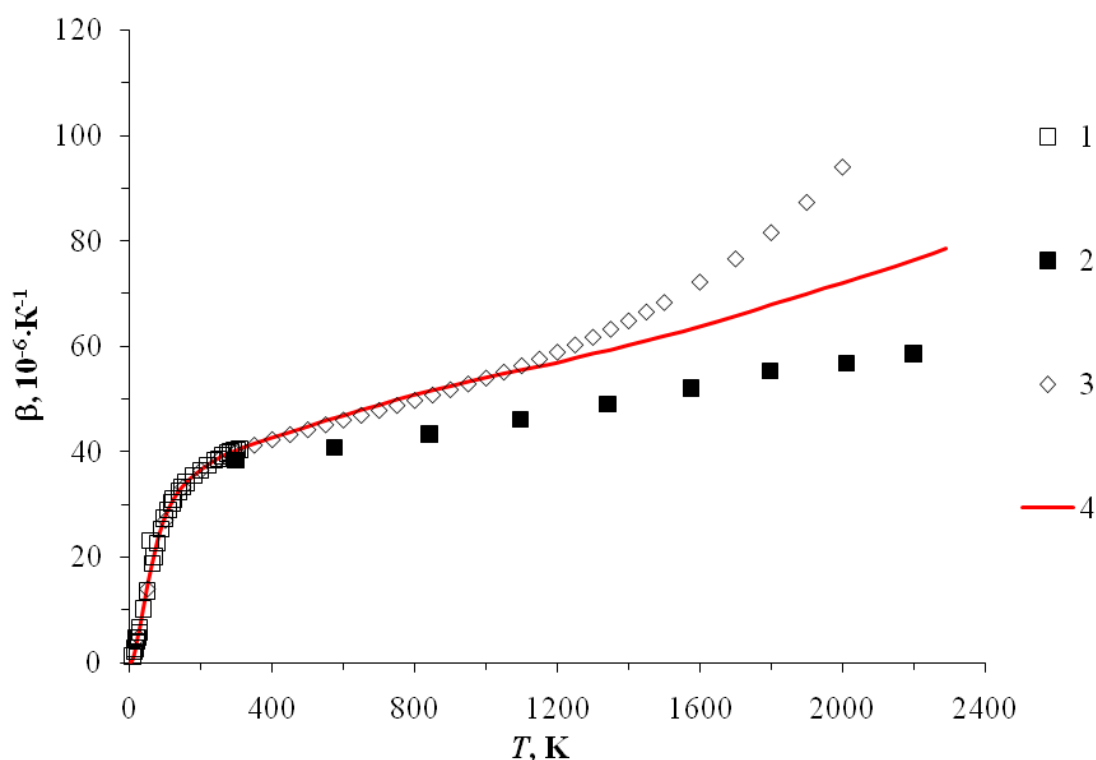


Рис. 8. Температурная зависимость коэффициента теплового объемного расширения  $\beta(T)$  оксида бария. Символы – табличные данные разных авторов: 1 – [43], 2 – [49], 3 – [58]; сплошная линия – тренд.

## 2.2. Анализ данных

Корреляция  $\beta(C)$  для SrO (рис. 9) линейна с высоким уровнем коэффициента корреляции ( $R^2 = 0,99938$ ,  $n = 83$  точек) вплоть до  $\sim 500$  К, что близко к температуре Дебая при этой температуре  $\theta \sim 450$  К. Линейность корреляции очевидна из рис. 10, где изображена разность коэффициента объёмного теплового расширения,  $\beta(C) - \beta_{lin}(C)$ . До температуры Дебая график  $\beta(C)$  практически совпадает с осью абсцисс, что свидетельствует о высоком уровне линейности. В области достижения теплоёмкостью SrO классического предела Дюлонга и Пти  $6R$  наблюдается отчетливое изменение характера зависимости  $\beta(C)$ . Наблюдается область излома, после которого корреляция  $\beta(C)$  снова имеет линейный характер, с высоким уровнем коэффициента корреляции ( $R^2 = 0,9998$ ,  $n = 47$  точек) вплоть до температуры плавления  $T_m$ .

Уравнения би-линейной модели  $\beta(C)$  для SrO:

$$Y(X) = \begin{cases} 0,78 \cdot X, & \text{I: } X \leq 47,75; \\ 0,03 \cdot X^2 - 2,83 \cdot X + 86,51, & \text{II: } 47,75 < X < 51,59; \\ 1,13 \cdot X - 17,57, & \text{III: } 51,59 \leq X. \end{cases}$$

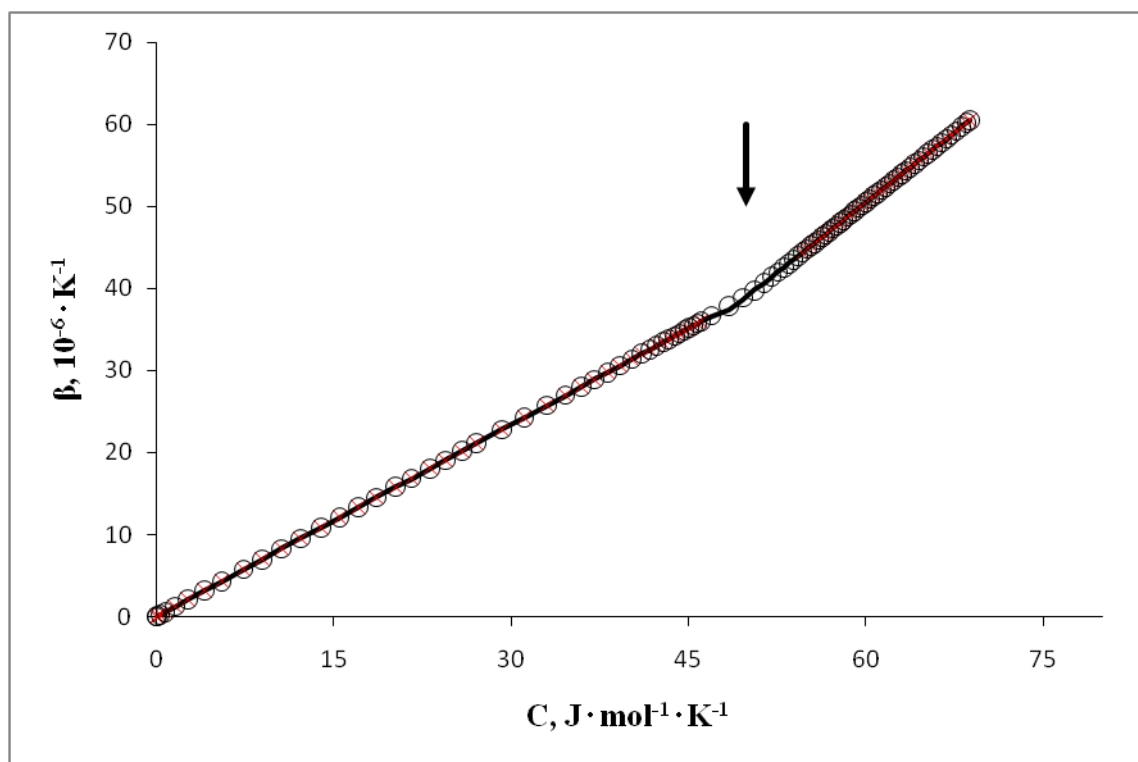


Рис. 9. Корреляционная зависимость КОТР и теплоёмкости  $\beta(C)$  оксида стронция. Приведены сглаженные значения КОТР и теплоёмкости; сплошная линия – линия уравнений би-линейной модели. Области линейности маркированы крестиками. Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга-Пти для теплоёмкости.

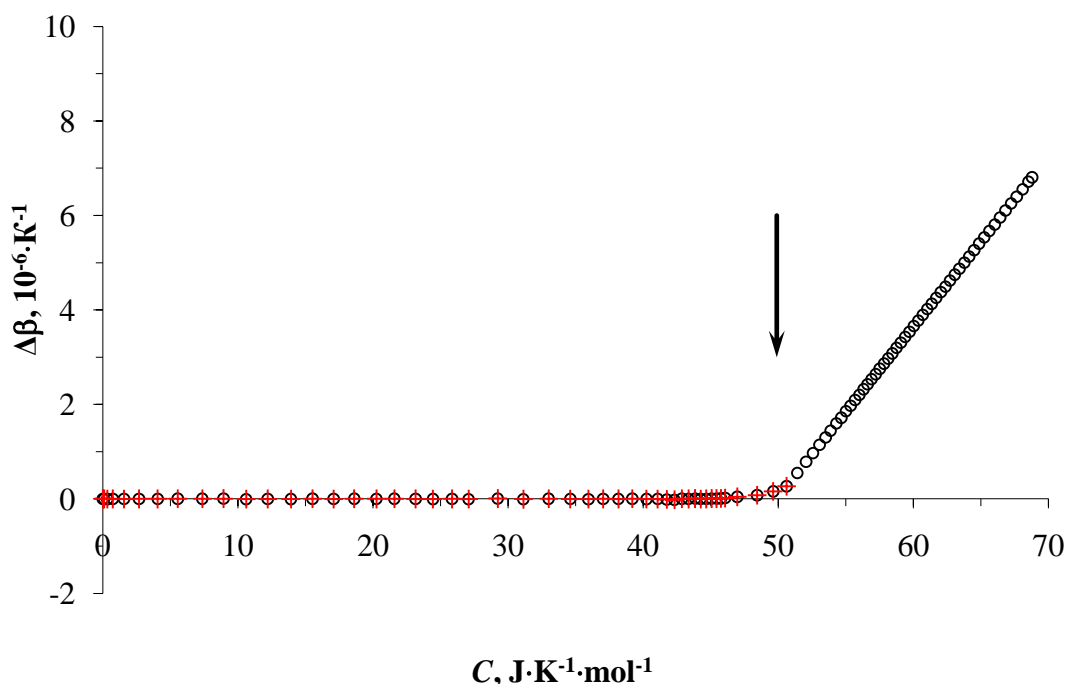


Рис. 10. Корреляционная зависимость разности КОТР и теплоёмкости  $\beta(C)$  оксида стронция, где  $\Delta\beta(C) = \beta(C) - \beta_{\text{lin}}(C)$ . Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга-Пти для теплоёмкости.

Построенная корреляционная зависимость  $\beta(C)$  для  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  (рис. 11) показывает, что значения в области ниже 300 К недостоверны и не вписываются в общий тренд, их можно принимать во внимание лишь на качественном уровне. Причиной этого является недостаток первоисточников. Значения  $C(T)$  и  $\beta(T)$  корреляционной зависимости  $\beta(C)$  для температурного диапазона от 300 К до классического предела Дюлонга-Пти  $7.3R$  линейны, с высоким коэффициентом корреляции ( $R^2 = 0,986$ ). На предел Дюлонга-Пти приходится излом, после которого значения так же линейны вплоть до температуры плавления  $T_m$ . Таким образом, корреляционная зависимость  $\beta(C)$  для  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  в целом соответствует предполагаемой би-линейной модели, что так же показано на разностной диаграмме  $\Delta\beta(C)$  (рис. 12).

Уравнения би-линейной модели  $\beta(C)$  для  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ :

$$Y(X) = \begin{cases} 0,15 \cdot X, & \text{I: } X \leq 169,87; \\ 0,0002 \cdot X^2 + 0,07 \cdot X + 7,91, & \text{II: } 169,87 < X < 178,61; \\ 0,15 \cdot X - 0,75, & \text{III: } 178,61 \leq X. \end{cases}$$

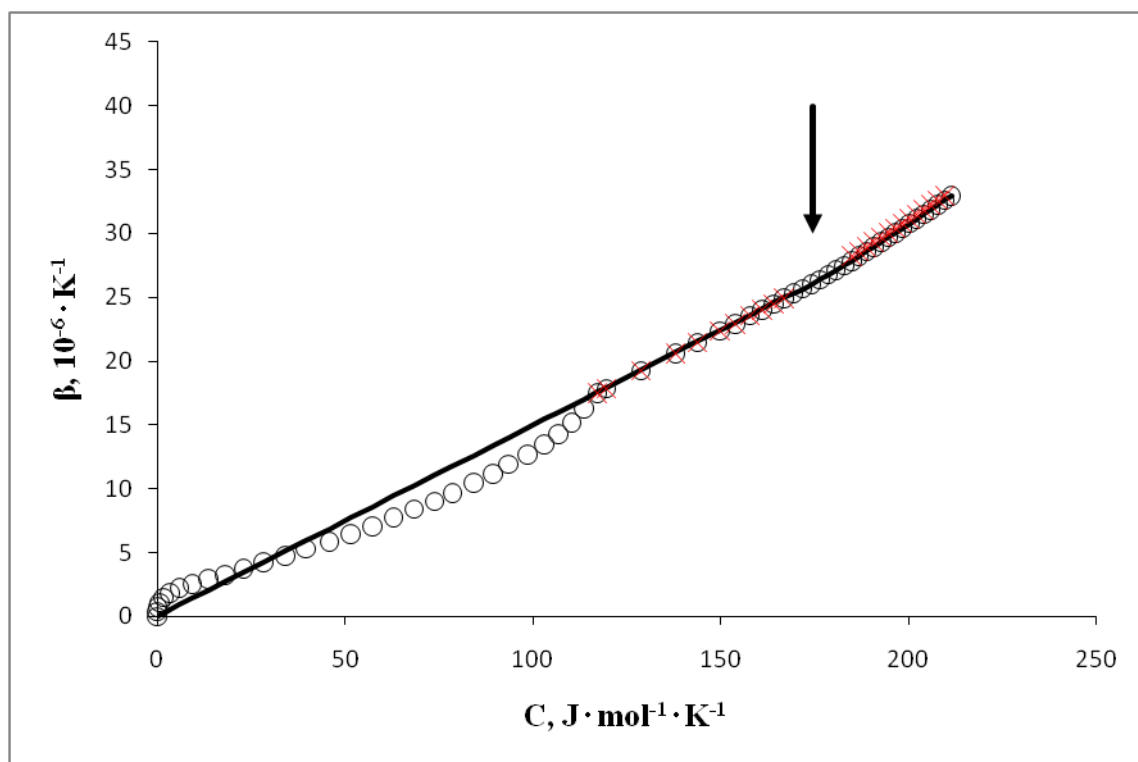


Рис. 11. Корреляционная зависимость КОТР и теплоёмкости  $\beta(C)$  смешанного оксида магния и алюминия. Приведены сглаженные значения КОТР и теплоёмкости; сплошная линия – линия уравнений би-лейной модели. Области линейности маркированы крестиками. Стрелка маркирует классический предел  $7 \cdot 3R$  Дюлонга-Пти для теплоёмкости.



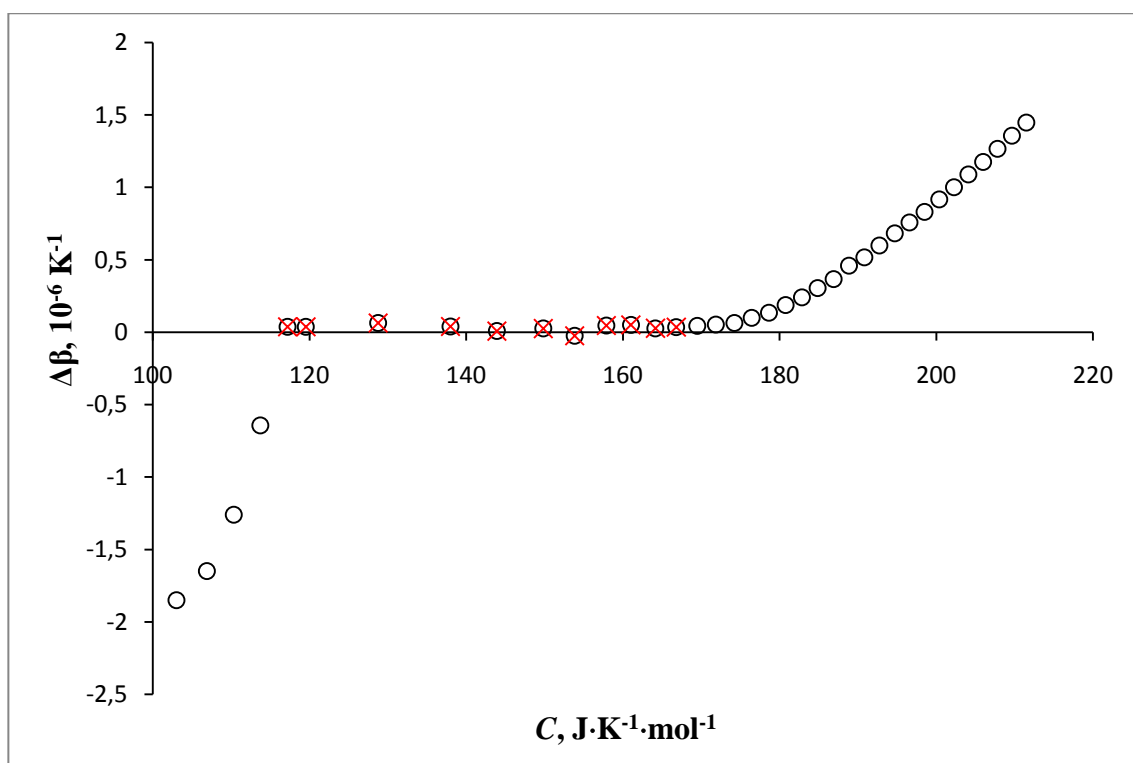


Рис. 12. Корреляционная зависимость разности КОТР и теплоёмкости  $\beta(C)$  смешанного оксида магния и алюминия, где  $\Delta\beta(C) = \beta(C) - \beta_{\text{lin}}(C)$ . Стрелка маркирует классический предел  $7 \cdot 3R$  Дюлонга-Пти для теплоёмкости.

Корреляционная зависимость  $\beta(C)$  для ВаО (рис. 13) линейна с высоким уровнем коэффициента корреляции ( $R^2 = 0,99785$ ,  $n = 96$  точек) вплоть до  $\sim 450$  К, что близко к температуре Дебая  $\theta \sim 400$  К. Как и для других оксидов, линейность корреляции очевидна из разностной диаграммы  $\Delta\beta(C)$ . Ниже классического предела Дюлонга и Пти график  $\Delta\beta(C)$  (рис. 14) практически совпадает с осью абсцисс, что свидетельствует о высоком уровне линейности. В области достижения теплоёмкостью ВаО классического предела Дюлонга и Пти наблюдается излом, после которого корреляция  $\beta(C)$  снова имеет линейный характер, с высоким уровнем коэффициента корреляции ( $R^2 = 0,9995$ ,  $n = 36$  точек) вплоть до температуры плавления  $T_m$ .

Уравнения би-линейной модели  $\beta(C)$  для ВаО:

$$Y(X) = \begin{cases} 0,85 \cdot X, & \text{I: } X \leq 48,36; \\ 0,08 \cdot X^2 - 6,9 \cdot X + 184,53, & \text{II: } 48,36 < X < 52,29; \\ 2,04 \cdot X - 59,87, & \text{III: } 52,29 \leq X. \end{cases}$$

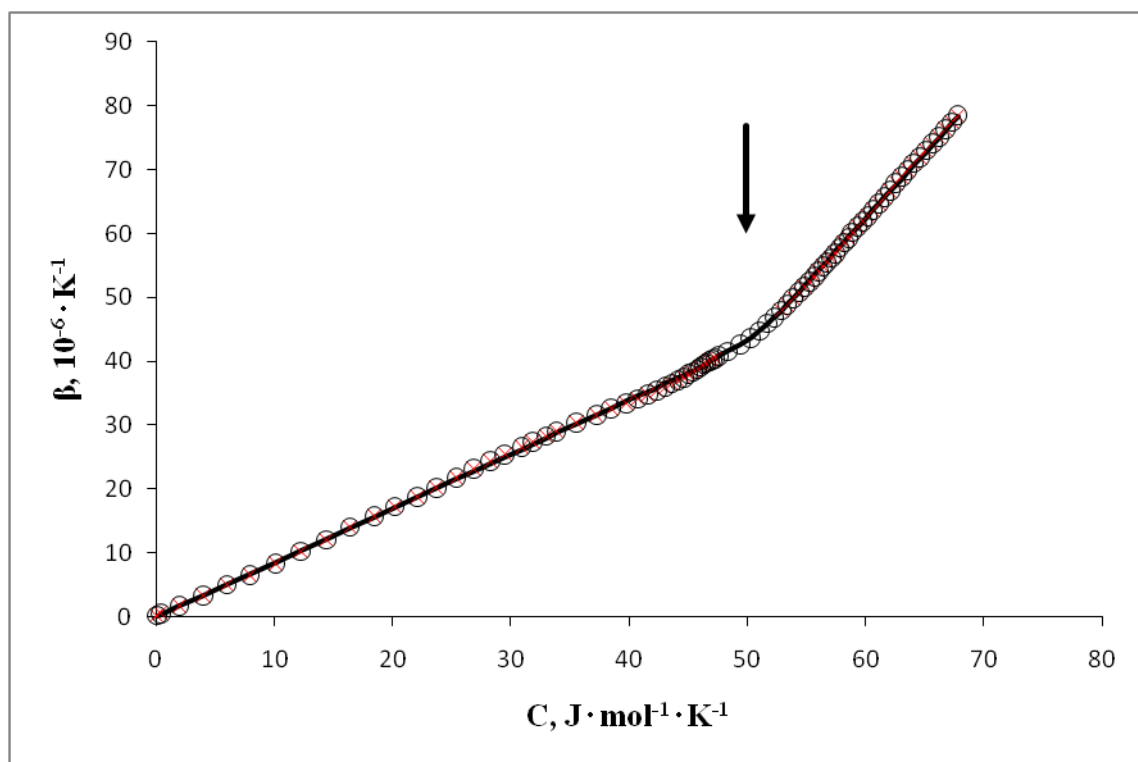


Рис. 13. Корреляционная зависимость КОТР и теплоёмкости  $\beta(C)$  оксида бария. Приведены сглаженные значения КОТР и теплоёмкости; сплошная линия – линия уравнений би-линейной модели. Области линейности маркированы крестиками. Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга-Пти для теплоёмкости.

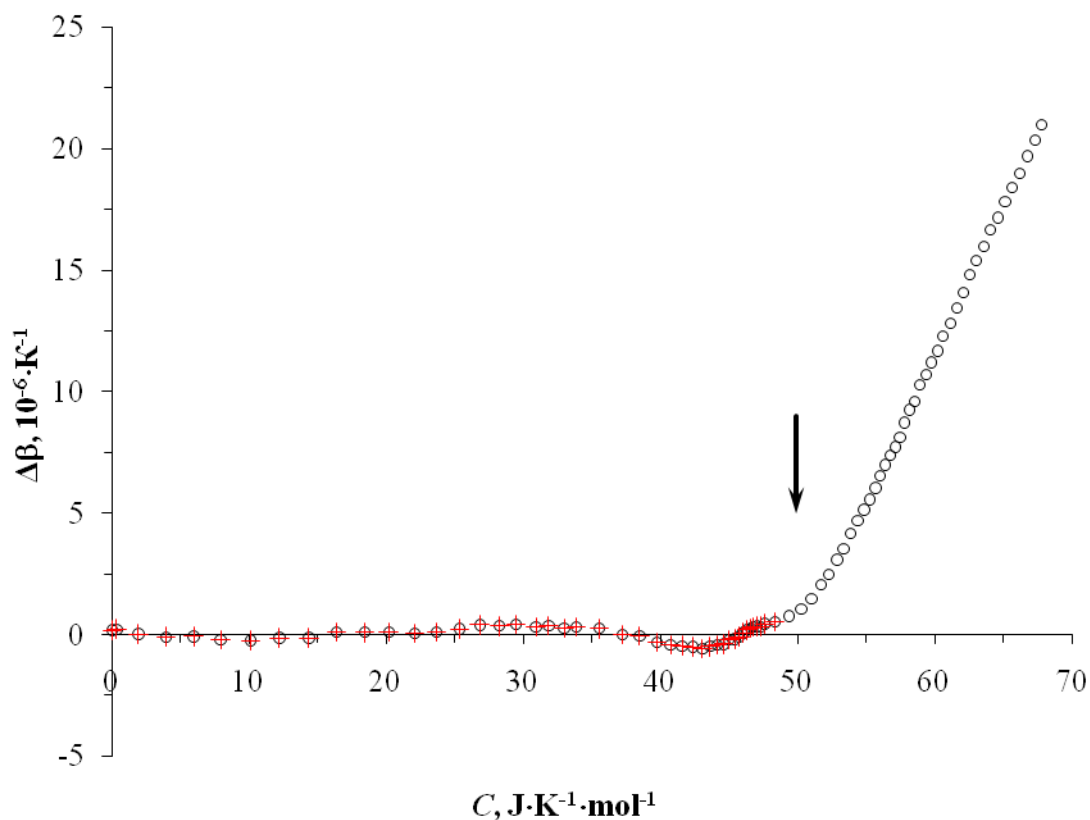


Рис. 14. . Корреляционная зависимость разности КОТР и теплоёмкости  $\beta(C)$  оксида бария, где  $\Delta\beta(C) = \beta(C) - \beta_{\text{lin}}(C)$ . Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга-Пти для теплоёмкости.

Наличие выраженных характерных корреляционных взаимозависимостей  $\beta(C)$  для всех трех изученных оксидных керамик  $\text{SrO}$ ,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  и  $\text{BaO}$ , вместе с ранее полученными аналогичными результатами для многих других веществ, позволяет предположить, что подобное поведение имеет место и у других твердых тел. Наличие корреляции  $\beta(C)$ , в частности, позволяет восстанавливать одно, малоизученное свойство по другому, изученному более полно. Такая возможность уникальна и, как это было продемонстрировано на примере изученных оксидных керамик, имеет широкие перспективы для использования на практике.

## Заключение

В ходе выполнения настоящей выпускной квалификационной работы была проделана научно–исследовательская работа по прикладному анализу теплофизических свойств оксидных керамик, имеющих кубическую кристаллическую структуру, а именно оксида стронция, смешанного оксида магния и алюминия, оксида бария.

Реализованы поставленные задачи по поиску, обработке, анализу и интерпретации статистических данных по теплоемкости и объёмному коэффициенту теплового расширения  $\text{SrO}$ ,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  и  $\text{BaO}$ . Поиск информации осуществлялся с использованием интернета и электронных библиотек. Всего для указанных оксидных керамик было найдено 46 первоисточников, из которых 32 по теплоёмкости  $C(T)$  и 14 по коэффициенту теплового расширения  $\beta(T)$ . По количеству найденных первоисточников для каждого из свойств можно сделать вывод о том, что коэффициент объёмного теплового расширения изучен в меньшей степени, чем теплоемкость.

По найденным данным построены первичные температурные зависимости свойств изученных керамик. Рассчитаны трендовые значения теплофизических свойств  $C(T)$  и  $\beta(T)$ . Полученные сглаженные линии трендов для каждого из свойств.

Для всех трёх исследуемых оксидов  $\text{SrO}$ ,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  и  $\text{BaO}$  во всей области твердого состояния наблюдается высокая парная «би-линейная» корреляция: корреляционная зависимость  $\beta(C)$  «распадается» на два гладко сопряженных линейных участка с изломом вверх, приходящимся на классический предел Дюлонга и Пти. Установлена справедливость гипотезы о существовании корреляционной зависимости между теплофизическими свойствами изучаемых оксидных керамик с кубической кристаллической структурой ( $\text{SrO}$ ,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ,  $\text{BaO}$ ), а именно, теплоёмкостью и коэффициентом объёмного теплового расширения.

Важно отметить, что прежде всего гипотеза о би-линейном характере корреляции была проверена на модельном объекте оксиде алюминия  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , который подробно изучен в работе научного руководителя [9]. Далее гипотеза о би-линейном характере корреляции подтвердилась и для исследуемых оксидных керамик с кубической кристаллической структурой  $\text{SrO}$ ,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ,  $\text{BaO}$ .

Достигнута цель настоящей работы по формированию и развитию профессиональных и общепрофессиональных компетенций, на примере выполнения исследования по прикладному анализу теплофизических свойств оксидных керамик. Выполнение такой работы развивает следующие способности:

1. Способность использовать базовые знания естественных наук, математики и информатики, основные факты, концепции, принципы теорий, связанных с прикладной математикой и информатикой;
2. Способность приобретать новые научные и профессиональные знания, используя современные образовательные и информационные технологии;
3. Способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учётом основных требований информационной безопасности;
4. Способность собирать, обрабатывать и интерпретировать данные современных научных исследований, необходимые для формирования выводов по соответствующим научным исследованиям.

Вышеуказанные способности – это необходимые компетенции для студентов–прикладников, указанные в ФГОС ВО по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» [32].

## Библиографический список

1. Баймурзина И.Р., Ходарченко В.В., Бодряков В.Ю. ИКТ в формировании и развитии исследовательских компетенций студентов, обучающихся по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» / В сб. научных работ «Актуальные вопросы преподавания математики, информатики и информационных технологий». Екатеринбург: УрГПУ, 2016. – 294 с.
2. Башкатов А.Н., Бодряков В.Ю., Ушакова Л.Р. Формирование устойчивых самообразовательных и исследовательских компетенций у студентов вуза как «спусковой» механизм готовности выпускников к обучению в течение всей жизни / Материалы МНПК «Обучение в течение всей жизни: «LifeLongLearning: дополнительное образование как фактор личностного и профессионального развития»». Вып. 8. Екатеринбург: УрФУ, 9 – 10 апреля 2015 г., С. 33–42. [Сб. Трудов конференции. Вып. 8. Екатеринбург: ООО «ИПП» Макс–Инфо, 2015. – 301 с.]
3. Бодряков В. Ю., Быков А. А. Особенность корреляционной зависимости объемного коэффициента теплового расширения свинца от его теплоемкости // Электронное научное издание «Актуальные инновационные исследования: наука и практика». 2014. №2. 9 с.
4. Бодряков В.Ю. О корреляции коэффициента теплового расширения и теплоемкости кристалла инертного газа ксенона // Неорган. Матер. 2015. Т.51. №2. С.213-217.
5. Бодряков В.Ю. Корреляция коэффициента теплового расширения и теплоемкости кристалла инертного газа: криптон // ЖТФ. 2015. Т. 85. Вып. 3. С. 65–68.
6. Бодряков В.Ю. О корреляции коэффициента теплового расширения и теплоемкости кристалла аргона // ФТТ. 2014. Т.56. Вып.11. С. 2279–2285.

7. Бодряков В.Ю. О корреляции температурных зависимостей теплового расширения и теплоемкости вплоть до точки плавления тугоплавкого металла: Вольфрам // ТВТ.2015. Т.53. №5. С.676–682.
8. Бодряков В.Ю. О корреляции температурных зависимостей теплового расширения и теплоемкости вплоть до точки плавления тугоплавкого металла: молибден // Теплофизика высоких температур. 2014. Т.52. № 6. С.863–869.
9. Бодряков В.Ю., Быков А.А. Корреляционные характеристики температурного коэффициента объемного расширения и теплоемкости корунда // Стекло и Керамика. 2015. №2. С.30-33.
10. Бодряков В.Ю., Быков А.А. Особенность корреляционной зависимости объемного коэффициента теплового расширения алюминия от его теплоемкости // Электронное научное издание «Актуальные инновационные исследования: наука и практика». 2014. №1.9с.
11. Бодряков В.Ю., Карпова Е.В. Применение корреляционного анализа для взаимосогласованной оценки коэффициента теплового расширения и теплоемкости огнеупорной керамики: MgO // Огнеупоры и Техническая Керамика. 2015. №10. С. 18–21.
12. Бодряков В.Ю., Ушакова Л.Р. Практический опыт формирования исследовательских компетенций студентов, обучающихся по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» // Педагогическое образование в России. 2015. №7. С.172–181.
13. Бодряков В.Ю., Ушакова Л.Р., Башкатов А.Н. Развитие исследовательских компетенций студентов как инструмент формирования высоких профессиональных качеств современного инженера / Материалы МНПК «Формирование инженерного мышления в процессе обучения», 7-8 апреля 2015 г., Екатеринбург: УрГПУ, 2015. [284 с.], С. 33–37.
14. Васильев А. Н. Числовые расчеты в Excel: Учебное пособие. СПб.: Лань, 2014. – 608 с.

15. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание. В 4-х томах. Том III. М.: Наука, 1981. Книга 1 – 472 с.; Книга 2 – 400 с.
16. Единая коллекция ЦОР [Электронный ресурс]. URL: <http://files.school-collection.edu.ru/dlrstore/965cf8d9-b573-fd22-b97b-9753e36f6ee1/1011837A.htm>
17. Иргашов Х., Тарасов В. Д., Чеховской В. Д. Термодинамические свойства оксида стронция в твердой и жидкой фазах // ТВТ. 1985. Т. 23. №1. С. 86-91.
18. Иргашов Х., Тарасов В. Д., Чеховской В. Я. Энтальпия и теплоемкость ВаО в области высоких температур 1200 – 2200 К // ТВТ. 1983. Т. 21. Вып. 5. С. 904–908.
19. Князев А.В., Черноруков Н.Г., Князева С.С., Ладенков И.В. // Высокотемпературные рентгеновские исследования некоторых шпинелей // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2012, № 4 (1), с. 148–153
20. Коэффициент теплового расширения // Википедия. Свободная энциклопедия [Электронный ресурс] / URL:[https://ru.wikipedia.org/wiki/ Коэффициент\\_теплового\\_расширения](https://ru.wikipedia.org/wiki/Коэффициент_теплового_расширения) (последнее изменение: 26.09.16).
21. Кругосвет [Электронный ресурс]. URL: [http://www.krugosvet.ru/enc/nauka\\_i\\_tehnika/himiya/STRONTSI.html?page=0,1](http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/STRONTSI.html?page=0,1)
22. Лемешев Д.О., Сенина М.О. Способы синтеза порошков алюмомагниевого шпинели для получения оптически прозрачной керамики. // Успехи в химии и химической технологии . Том 30. 2016. №7.
23. Линии тренда // Википедия. Свободная энциклопедия [Электронный ресурс] / URL:[https://ru.wikipedia.org/wiki/Линии\\_тренда](https://ru.wikipedia.org/wiki/Линии_тренда) (последнее изменение: 05.07.15).
24. Молярная теплоёмкость // Википедия. Свободная энциклопедия [Электрон-



ный ресурс] / URL:[https://ru.wikipedia.org/wiki/Молярная\\_теплоёмкость](https://ru.wikipedia.org/wiki/Молярная_теплоёмкость) (последнее изменение: 02.04.16).

25. Оксид бария // Википедия. Свободная энциклопедия [Электронный ресурс] / URL:[https://ru.wikipedia.org/wiki/Оксид\\_бария](https://ru.wikipedia.org/wiki/Оксид_бария) (последнее изменение: 01.04.17).

26. Оксид стронция // Википедия. Свободная энциклопедия [Электронный ресурс] / URL:[https://ru.wikipedia.org/wiki/Оксид\\_стронция](https://ru.wikipedia.org/wiki/Оксид_стронция) (последнее изменение: 11.08.13).

27. Ушакова Л. Р., Бодряков В. Ю. ИКТ как эффективный инструмент формирования и развития профессионально значимых компетенций студентов – прикладников в области поиска, анализа и интерпретации статистической информации. С. 110–116. В межвузовском сб. научных работ «Актуальные вопросы преподавания математики, информатики и информационных технологий». Екатеринбург: УрГПУ, 2016. – 294 с.

28. Федеральный государственный стандарт высшего образования по направлению подготовки 01.03.02 Прикладная математика и информатика (уровень бакалавриата), утв. приказом Минобрнауки РФ №228 от 12.03.2015 [Электронный ресурс] URL: <http://www.consultant.ru>.

29. Физические величины // ред. Григорьев И.С., Мейлихов Е.З. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

30. Шпинель // Википедия. Свободная энциклопедия [Электронный ресурс] / URL:<https://ru.wikipedia.org/wiki/Шпинель> (последнее изменение: 27.02.17).

31. Aoumeur-Benkabou F.Z., Belgoumène B.. Structural and dynamical properties of SrO in the rock-salt phase // CALPHAD. 2004. V. 28. Issue 1. P. 65–69.

32. Beals R. J. and Cook R. L. Directional Dilatation of Crystal Lattices at Elevated Temperatures // J. Amer. Ceram. Soc. 1957. V. 40. N. 8. P. 279-284.

33. Bodryakov V. Yu. On Correlation between Heat Capacity and Thermal Expansivity of Cubic Pt-Metals (Following to the John Arblaster's Evaluations) // Open Sci. J. Mod. Phys. 2015. V. 2. N. 1. P. 10-13.
34. Bodryakov V. Yu. Specific Heat and Thermal Expansion of Refractory Nonmetal: CaO // Open Sci. J. Mod. Phys. 2015. V. 2. N. 4. P. 50–54.
35. Burghartz St., Schulz B. Thermophysical properties of sapphire, AlN and MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, down to 70 K// Journal of Nuclear Materials 212-215 (1994) 1065-1068
36. Chase M. W., Davies C. A., Downey J. R., Frurip D. J. , McDonald R. A., and Syverud A. N. J. Phys. JANAF Thermochemical Tables Third Edition // Chem. Ref. Data, Vol. 14, Suppl. 1, 1985
37. Chase M.W.. NIST-JANAF Thermochemical Tables // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1998. Monograph 9. P. 1-1951.
38. Cordfunke E. H. P. Thermophysical and Thermochemical Properties of BaO and SrO from 5 to 1000 K // J. Phys. Chem. Solids. 1994. V. 55. N. 1. P. 77-84.
39. Gmelin. E. Thermal Properties of Alkaline-Earth-Oxides. I. Specific heat measurements // Z. Naturforsch. 1969. V.24a. N.11. P. 1794–1800.
40. Grimes N. W., E A Al-Ajaj // Low-temperature thermal expansion of spinel // 3. Phys.: Condens. Matter 4 (1992) 63756380. Printed in the UK
41. Kelley K.K.. Contributions to the data on theoretical metallurgy. XIII. High temperature heat content, heat capacity and entropy data for the elements and inorganic compounds. Washington: US Government printing office, 1960. – 232 p.
42. Klemme S., Ahrens M. Low-temperature heat capacities of MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> and spinels of the MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>–MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> solid solution // Phys Chem Minerals (2007) 34:59–72
43. Kwang-Oh Park and Sivertsen J.M.. Temperature Dependence of the Thermal Expansivity of Annealed BaO // J. Am. Ceram. Soc. 1979. V. 62. N. 3-4. P. 218-219.

44. Lander J. J. Experimental Heat Contents of SrO, BaO, CaO, BaCO<sub>3</sub> and SrCO<sub>3</sub> at High Temperatures. Dissociation Pressures of BaCO<sub>3</sub> and SrCO<sub>3</sub> // J. Am. Chem. Soc. 1951. V. 73. Issue 12. P. 5794–5797.
45. Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter. // Eds. O. Madelung, U. Rössler, M. Schulz. Berlin – Heidelberg: Springer-Verlag, 1999.
46. Richard A. Robie, Bruce S. Hemingway, and James R. Fisher. Thermodynamic properties of minerals and related substances at 298,15 K (25 °C) and one atmosphere (1,013 Bars) pressure and at higher temperatures // Geological survey bulletin. N. 1452. Washington: US Government printing office, 1979. – 456 p.
47. Rieder K. H., Migoni R., Renker B. Lattice dynamics of strontium oxide // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N. 8. P. 3374–3379.
48. Rimshaw S. J., Ketchen E. E. Strontium-90 Data Sheets / /AEC Research and development report ORNL–4043, OAK Ridge National Laboratory (US), November 1966. – 45 p.
49. Robert R. Reeber and Kai Wang. Corresponding States Principles for the Thermal Expansion of MgO, CaO, SrO and BaO // Chapter in Ceramic Engineering and Science Proceedings, January, 2003. In book: 27th Annual Cocoa Beach Conference on Advanced Ceramics and Composites: B: Ceramic Engineering and Science Proceedings. 2003. V. 24. Issue 4. pp. 149–155. // Editors: Kriven, W. M. and Lin, H. T.
50. Ruppin R. Grüneisen parameters and thermal expansion of CaO and SrO // Solid State Comm. 1972. V. 10. Issue 11. P. 1053–1056.
51. Shukla Adarsh. Development Of A Critically Evaluated Thermodynamic Database For The Systems Containing Alkaline-Earth Oxides // Thèse Présentée En Vue De L’obtention Du Diplôme De Philosophiae Doctor (Génie Métallurgique), Université De Montréal (Juillet), 2012. – 321 p.
52. Simon A.T. Redfern, Richard J. Harrison, Hugh St.C. O’neill,<sup>3</sup> And David R.R. Wood // Thermodynamics and kinetics of cation ordering in MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

spinel up to 1600 °C from in situ neutron diffraction // *American Mineralogist*, Volume 84, pages 299–310, 1999

53. Souadkia M., Bennecer B., Kalarasse F. Ab initio lattice dynamics and thermodynamic properties of SrO under pressure // *J. Phys. Chem. Solids*. 2012. V. 73. Issue 1. P. 129–135

54. Stull D. R. and Prophet H. JANAF Thermochemical Tables: U.S. Department of Commerce, Washington. 1985.

55. Touloukian Y.S., Ho C.Y. Thermophysical properties of matter. The TPRC Data Series. V. 5. Specific Heat – Nonmetallic Solids. NY–Washington: IFI/Plenum. 1970, 1730 p.

56. Travis C. A. The Heat Capacities at Low Temperatures of the Oxides of Strontium and Barium // *J. Am. Chem. Soc.* 1935. V. 57. N. 3. P. 429–431.

57. Trivedi R. K., Mishra K. K., Upadhyay S. K., Upadhyay G. K., Upadhyaya K. S. Effect of van der Waals and three body interactions on the lattice dynamics of Ionic crystals: an application to SrO // *IOSR Journal of Applied Physics (IOSRJAP)*. 2012. V. 1. Issue 2. P. 24-32.

58. Upadhyay S. P. and Kumar M. Thermal Expansion and Compression of Alkaline Earth Oxides and Cesium Halides at High Temperature and High Pressure // *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1995. V. 191. Issue 2. P. 299–305.

## Приложение 1.

Таблица 1. Основные физические свойства  $\text{SrO}$ ,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  и  $\text{BaO}$

Вещество	$\text{SrO}$	$\text{MgAl}_2\text{O}_4$	$\text{BaO}$
Традиционное (альтернативное) название	Оксид стронция, strontia	Смешанный оксид магния и алюминия, шпинель	Оксид бария, baria
Молярная масса $\mu$ , г·моль <sup>-1</sup>	103,62	142.2641	153,3394
Плотность $\rho$ , г·см <sup>-3</sup>	4,7	3,578	5,72
Температура плавления $T_m$ , К	2930	2100	2190
Кристаллическая структура	Кубическая (типа NaCl)	Кубическая (типа NaCl)	Кубическая (типа NaCl)
Температура Дебая $\theta$ , К	~ 450	~ 900	~ 400

## Приложение 2.

### Характеристика первоисточников данных SrO, MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> и BaO.

Таблица 2. Характеристика первоисточников данных: теплоемкости SrO

Ссылка	Год	$\Delta T$ , К	Ошибка	Спецификация
[29]	1991	80 – 1500	–	Справочник. Содержит усредненные табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1991 г.
[46]	1979	298 – 1800	–	Справочник. Содержит усредненные табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1979 г.
[56]	1935	58 – 298	–	The samples of SrO were Kahlbaum best grade. An analysis of the samples showed a considerable amount of carbonate as the principal impurity.
[44]	1951	390 – 1270	0,1%	The heat contents of SrO have been measured using the "drop" method in which the sample at a measured temperature in a capsule of known heat content is dropped from a furnace into a calibrated calorimeter, usually made of copper.
[41]	1960	298 – 1800	–	Справочник. Содержит усредненные табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1960 г.
[48]	1966	298 – 1473	–	Review paper. Heat capacity is computed with the formula: Specific heat (in cal g <sup>-1</sup> °C <sup>-1</sup> ): $C_p = 0,119 + 1,08 \cdot 10^{-5} \cdot T - 1,74 \cdot 10^{-3} \cdot T^2$ , $T$ in K.
[39]	1969	4 – 300	0,5%	Powder-pressed sample of weight 0.4013 mol. Impurities total < 2%.
[55]	1970	58 – 1265	–	Справочник. Содержит табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1970 г.
[47]	1975	0 – 200	–	The phonon dispersion curves obtained by inelastic neutron scattering..
[15]	1981	100-6000	–	Сведения отсутствуют.
[17]	1985	298,15 – 2805	0,84-1,46%	99,9 мас.% SrO, метод смешения
[38]	1962	5 – 2000		Carbonate impurities if present were below the detection limit (<0.15%); for the measurements 10.2139 g of SrO-16 (corresponding to 0.09857 moles using a molar mass of 103.620 g/mol) was loaded into the calorimeter
[36]	1998	298 – 2900	–	Review monograph. Contains average data by original tabulated works published before 1998.
[45]	1999	5 – 2650	–	A handbook. Contains data by original tabulated works published before 1999.
[57]	2012	0 – 305	–	A new model of lattice dynamics has been developed by incorporating the effect of van der
[51]	2012	298,15 < $T$ < $T_m$	–	PhD Thesis literature review. Expression is used: $C_p(\text{J/mol/K}) = 47,56 + 0,00614 \times T - 380000 \times T^{-2}$ ; $T_m = 2703$ K.

Таблица 3. Характеристика первоисточников данных: КТР SrO

Ссылка	Год	$\Delta T$ , К	Ошибка	Спецификация
[29]	1991	300	–	Справочник. Содержит табулированные данные $\alpha(T = 300 \text{ K})$ .
[45]	1999	279 – 809	–	A handbook. Contains data by original tabulated works published before 1999.
[32]	1957	293 – 1473	–	The X-ray measurement of lattice parameters of crystals at elevated temperatures provides a means of determining the true thermal expansion of a crystal. In this investigation, a furnace in which temperatures above 1200 °C could be accurately maintained and a specially designed circular back-reflection X-ray camera were employed in measuring the thermal dilatation of crystals representative of the cubic, hexagonal, rhombohedral, and tetragonal systems. Thermal-expansion values were obtained above 293 K up to 1473 K. Materials of reagent grade, or of the highest purity available, were employed in this study.
[50]	1972	20 – 1200	–	Calculations of the coefficient of thermal expansion from pressure dependent lattice-dynamical shell models are presented.
[58]	1995	298 – 2727	–	Temperature dependence of thermal expansion and compression of alkaline earth oxides and cesium halides with NaCl- and CsCl-type structures is investigated. The theory of interionic potentials based on the quantum mechanical form of the overlap repulsive energy is used to investigate the interatomic separations as a function of temperature and pressure from room temperature up to the melting temperature. The values of van der Waals dipole-dipole and dipole-quadrupole energies are also included in the model.
[49]	2003	25 – 2000	–	Representations for the thermal expansion of NaCl-structure-type oxides are established based on corresponding states principles and simple lattice dynamical models. The semi-empirical expressions provide quantitative information over an extended temperature range and predictions where data are limited or in some cases non-existent.
[31]	2004	750 – 1150	–	Molecular dynamics simulation study of structural and thermodynamic properties of SrO in the rock-salt (RS) structure, based on a three-body potential.
[53]	2012	300 – 900	–	<i>Ab initio</i> calculation of lattice dynamics and thermodynamic properties of SrO in the NaCl (B1) structured phases. Density-functional perturbation theory (DFPT) within the local density approximation (LDA) in conjunction with the quasi-harmonic approximation is used.

Таблица 4. Характеристика первоисточников данных: теплоемкости  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ 

Ссылка	Год	$\Delta T$ , К	Ошибка	Спецификация
[36]	1985	100 – 2800	–	JANAF Thermochemical Tables Third Edition
[35]	1994	4,33 – 305	–	Well characterized sapphire, aluminum nitride and magnesium aluminum spinel have been used for the determination of their specific heat, thermal expansion and thermal conductivity (thermal diffusivity).
[42]	2006	69 – 296	–	The heat capacities were measured in custom-built low-temperature vacuum calorimeters at the Max-Planck Institute.

Таблица 5. Характеристика первоисточников данных: КТР  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ 

Ссылка	Год	$\Delta T$ , К	Ошибка	Спецификация
[40]	1992	77 – 300	–	The lattice parameter of this prepared material was measured by the x-ray powder diffraction method using a Philips diffractometer fitted with stepscanning facilities and an Oxford Instruments continuous-flow low-temperature cryostat. The latter possessed a calibrated linear temperature sensor and provided control to 10.5 K over most of the investigated temperature range. An internal calibration standard was also incorporated by mixing the spinel powder with pure silicon in the ratio 73.
[52]	1999	298 – 1873	–	The temperature dependence of the cation distribution in synthetic spinel ( $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ) was determined using in-situ time-of-flight neutron powder diffraction. Neutron diffraction patterns of stoichiometric $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ and slightly non-stoichiometric $\text{Mg}_{0.99}\text{Al}_2\text{O}_4$ samples were collected under vacuum on heating from room temperature to 1600 8C, and the cation distribution was determined directly from site occupancies obtained by Rietveld refinement.
[19]	2012	298 – 1173	–	Методом высокотемпературной рентгенографии изучены температурные зависимости параметров элементарной ячейки и впервые определены коэффициенты теплового расширения 10 соединений со структурой шпинели.



Таблица 6. Характеристика первоисточников данных: теплоемкости BaO

Ссылка	Год	$\Delta T$ , К	Ошибка	Спецификация
[29]	1991	80 – 1500	–	Справочник. Содержит усредненные табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1991 г.
[46]	1979	298 – 1800	–	Справочник. Содержит усредненные табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1979 г.
[56]	1935	56 – 299	–	The samples of BaO were Kahlbaum best grade. An analysis of the samples showed a considerable amount of carbonate as the principal impurity.
[44]	1951	390 – 1270	0,5%	The heat contents of BaO (0.01771 mole) measured using the "drop" method in which the sample at a measured temperature in a capsule of known heat content is dropped from a furnace into a calibrated calorimeter, usually made of copper.
[41]	1960	400 – 2000	–	Справочник. Содержит усредненные табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1960 г.
[39]	1969	4 – 300	0,5%	Powder-pressed sample of weight 0.3149 mol. Impurities total < 0.3%. Impurities (ppm): Chlorines 500; Sulfides 20; X-ray investigations of the powders showed that all specimens are crystallized in the cubic-face-centered form.
[55]	1970	56 – 1262	–	Справочник. Содержит табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1970 г.
[15]	1981	100-2290	–	Справочник. Содержит усредненные табулированные данные $C(T)$ по первоисточникам, опубликованным до 1981 г. Теплоемкость BaO может быть вычислена с точностью 1,5% при 1000 К, 3% при 1500 К и 8% при температуре плавления BaO $T_m = 2290$ К.
[38]	1962	5-350; 470-877; 298.15-2000	1%	Carbonate impurities if present were below the detection limit (<0.15%); for the measurements 15.9346g of BaO (0.10392 moles with a molar mass of 153.329 g/mol) was loaded into the calorimeter
[37]	1998	298 – 2900	–	Review monograph. Contains average data by original tabulated works published before 1998.
[45]	1999	5 – 300	–	A handbook. Contains data by original tabulated works published before 1999.
[51]	1983	298 – 2200	0,3 – 0,65%	Метод смешения (дроп-калориметр); переплавленный образец BaO (плавка порошка производилась в воздухе при помощи радиационного нагрева). Примеси:
[54]	1985	$298,15 < T < T_m$	–	A handbook. Expression is used: $C_p(\text{J/mol/K}) = 59,418 + 0,00818 \cdot T - 156351 \cdot T^{-2} - 3762 \cdot T^{-1} - 0,216 \cdot T^{0,5}$ ; $T_m = 2286$ К.

Таблица 7. Характеристика первоисточников данных: КТР BaO

Ссылка	Год	$\Delta T$ , К	Ошибка	Спецификация
[58]	1995	298 – 2200	–	Temperature dependence of thermal expansion and compression of alkaline earth oxides and cesium halides with NaCl- and CsCl-type structures is investigated. The theory of interionic potentials based on the quantum mechanical form of the overlap repulsive energy is used to investigate the interatomic separations as a function of temperature and pressure from room temperature up to the melting temperature. The values of van der Waals dipole-dipole and dipole-quadrupole energies are also included in the model.
[49]	2003	25 – 2000	–	Representations for the thermal expansion of NaCl-structure-type oxides are established based on corresponding states principles and simple lattice dynamical models. The semi-empirical expressions provide quantitative information over an extended temperature range and predictions where data are limited or in some cases non-existent.
[43]	1979	20 – 300	$\pm 0,0055 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	The thermal-expansion coefficient of annealed sample of BaO was obtained by measuring the temperature-induced thermal strain with resistance strain gages mounted on each test sample.

### Приложение 3.

Сглаженные значения теплоёмкости и КОТР для SrO, MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> и BaO,

Таблица 8. Сглаженные значения молярной теплоемкости  $C(T)$  и КОТР  $\beta(T)$  для SrO. Температура  $T$  дана в К, теплоёмкость  $C(T)$  в J·mol<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>, КОТР  $\beta(T)$  в 10<sup>-6</sup> K<sup>-1</sup>.

$T$	$C(T)$	$\beta(T)$	$T$	$C(T)$	$\beta(T)$	$T$	$C(T)$	$\beta(T)$	$T$	$C(T)$	$\beta(T)$
5	0.0076	0.006	140	33.01	25.75	600	52.1	41.4	1800	60.3	50.86
10	0.0921	0.072	150	34.61	26.99	650	52.6	41.98	1850	60.7	51.24
15	0.3374	0.26	160	35.96	28.04	700	53.1	42.53	1900	61.0	51.62
20	0.7445	0.58	170	37.04	28.89	750	53.5	43.04	1950	61.3	51.99
25	1.5670	1.22	180	38.17	29.77	800	53.9	43.47	2000	61.7	52.38
30	2.68	2.09	190	39.20	30.58	850	54.3	43.96	2050	62.0	52.77
35	4.0652	3.17	200	40.25	31.39	900	54.7	44.36	2100	62.3	53.15
40	5.5488	4.33	210	41.08	32.04	950	55.1	44.77	2150	62.7	53.54
45	7.3689	5.75	220	41.76	32.56	1000	55.3	45.15	2200	63.0	53.94
50	8.9419	6.98	230	42.32	32.99	1050	55.6	45.53	2250	63.4	54.34
55	10.609	8.27	240	42.87	33.44	1100	56.1	45.89	2300	63.7	54.75
60	12.206	9.52	250	43.36	33.82	1150	56.3	46.25	2350	64.1	55.16
65	13.928	10.86	260	43.85	34.21	1200	56.6	46.59	2400	64.5	55.58
70	15.522	12.11	270	44.26	34.52	1250	56.9	46.93	2450	64.8	56.01
75	17.093	13.33	280	44.68	34.85	1300	57.2	47.27	2500	65.2	56.44
80	18.610	14.52	290	45.07	35.16	1350	57.5	47.62	2550	65.6	56.87
85	20.256	15.8	300	45.44	35.45	1400	57.8	47.97	2600	66.0	57.31
90	21.587	16.84	310	45.77	35.71	1450	58.1	48.32	2650	66.4	57.77
95	23.155	18.06	320	46.08	35.96	1500	58.4	48.67	2700	66.8	58.23
100	24.441	19.06	350	46.97	36.68	1550	58.7	49.03	2750	67.2	58.7
105	25.859	20.17	400	48.44	37.86	1600	59.0	49.39	2800	67.6	59.17
110	27.084	21.12	450	49.63	38.87	1650	59.4	49.76	2850	68.0	59.66
120	29.235	22.81	500	50.62	39.75	1700	59.7	50.12	2900	68.5	60.17
130	31.136	24.28	550	51.41	40.65	1750	60.0	50.49	$T_m$	68.8	60.47

Таблица 9. . Сглаженные значения молярной теплоемкости  $C(T)$  и КОТР  $\beta(T)$  для  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ . Температура  $T$  дана в К, теплоёмкость  $C(T)$  в  $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , КОТР  $\beta(T)$  в  $10^{-6} \text{ K}^{-1}$ .

$T$	$C(T)$	$\beta(T)$	$T$	$C(T)$	$\beta(T)$
0	0,00	0	500	149,829	22,32452
10	0,027	0,004023	550	153,858	22,92484
20	0,201	0,029949	600	157,887	23,52516
30	0,681	0,101469	650	161,021	23,99213
40	1,687	0,251363	700	164,155	24,4591
50	3,377	0,503173	750	166,814	24,85529
60	5,947	0,886103	800	169,473	25,25148
70	9,314	1,387803	850	171,856	25,60647
80	13,654	2,034433	900	174,238	25,96146
90	18,136	2,702288	950	176,448	26,29068
100	22,978	3,423676	1000	178,657	26,61989
110	28,310	4,21825	1050	180,755	26,9325
120	34,066	5,075822	1100	182,853	27,2451
130	39,609	5,901782	1150	184,874	27,54623
140	45,885	6,836808	1200	186,895	27,84736
150	51,553	7,681419	1250	188,862	28,14036
160	57,325	8,541408	1300	190,828	28,43337
170	62,893	9,371074	1350	192,757	28,72079
180	68,463	10,20096	1400	194,686	29,00821
190	73,833	11,00117	1450	196,586	29,29124
200	78,589	11,70969	1500	198,485	29,57427
210	84,237	12,55128	1550	200,362	29,85386
220	89,409	13,32191	1600	202,238	30,13346
230	93,509	13,93282	1650	204,100	30,4109
240	98,668	14,70156	1700	205,962	30,68834
250	103,028	15,35113	1750	207,807	30,96317
260	106,903	15,92862	1800	209,651	31,238
270	110,340	16,44063	1850	211,488	31,51171
280	113,713	16,94327	1900	213,325	31,78543
290	117,199	17,4627	1950	215,154	32,05787
300	119,544	17,81211	2000	216,982	32,33032
350	128,766	19,18616	2050	218,802	32,6015
400	137,988	20,56021	2100	220,622	32,87268
450	143,909	21,4423665			

Таблица 10. . Сглаженные значения молярной теплоемкости  $C(T)$  и КОТР  $\beta(T)$  для ВаО. Температура  $T$  дана в К, теплоёмкость  $C(T)$  в  $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , КОТР  $\beta(T)$  в  $10^{-6} \text{ K}^{-1}$ .

$T$	$C(T)$	$\beta(T)$	$T$	$C(T)$	$\beta(T)$	$T$	$C(T)$	$\beta(T)$	$T$	$C(T)$	$\beta(T)$
5	0.043	0.22	140	38.49	32.59	600	52.28	46.82	1800	62.56	67.89
10	0.368	0.54	150	39.76	33.41	650	52.87	47.93	1850	63.05	68.88
15	1.954	1.68	160	40.75	34.14	700	53.36	48.81	1900	63.55	69.89
20	3.961	3.27	170	41.58	34.81	750	53.89	49.89	1950	64.06	71.01
25	5.994	5.01	180	42.35	35.42	800	54.38	50.81	2000	64.58	71.95
30	7.946	6.54	190	43.07	35.95	850	54.83	51.65	2050	65.11	73.05
35	10.12	8.35	200	43.62	36.51	900	55.25	52.42	2100	65.65	74.09
40	12.24	10.25	210	44.14	37.01	950	55.68	53.27	2150	66.2	75.15
45	14.38	12.06	220	44.62	37.46	1000	56.03	54.06	2200	66.76	76.32
50	16.4	14.01	230	45.01	37.96	1050	56.41	54.83	2250	67.33	77.46
55	18.44	15.73	240	45.41	38.34	1100	56.75	55.52	$T_m$	67.8	78.5
60	20.21	17.24	250	45.76	38.73	1150	57.11	56.17			
65	22.08	18.78	260	46.06	39.15	1200	57.46	56.85			
70	23.69	20.21	270	46.31	39.48	1250	57.81	57.77			
75	25.38	21.76	280	46.56	39.75	1300	58.19	58.62			
80	26.84	23.17	290	46.79	40.01	1350	58.56	59.28			
85	28.28	24.35	300	47.04	40.24	1400	58.88	60.21			
90	29.49	25.43	310	47.31	40.46	1450	59.35	61.05			
95	30.93	26.56	320	47.59	40.81	1500	59.78	61.92			
100	31.86	27.39	350	48.36	41.54	1550	60.19	62.74			
105	32.99	28.26	400	49.39	42.66	1600	60.62	63.71			
110	33.85	29.04	450	50.28	43.69	1650	61.15	64.67			
120	35.55	30.41	500	51.02	44.76	1700	61.61	65.69			
130	37.24	31.58	550	51.71	45.92	1750	62.08	66.73			

## Приложение 4.

Первичные данные теплоемкости  $C(T)$  для SrO. Температура  $T$  дана в К, теплоёмкость  $C(T)$  в  $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

Таблица 11. Travis C. A [56]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
57.9	11.61897	111.2	26.96588	222.6	41.75632
61.2	12.56037	126.1	30.1248	238.3	42.59312
64.3	13.71515	138.4	32.32558	254.4	43.42992
70	15.5603	149.9	34.20838	273.3	44.01568
76.8	17.6523	168.6	36.64347	279.9	44.47592
86.8	20.48486	185.3	38.47188	290.4	44.64328
97.1	23.31743	207.7	40.35468	298.4	45.06168

Таблица 12. Lander J. J. [9].

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
390	48.49015	850	54.56787
400	48.7823	900	54.91515
450	50.00779	950	55.24507
500	50.95108	1000	55.56101
550	51.70995	1050	55.86556
600	52.34323	1100	56.16076
650	52.88804	1150	56.44819
700	53.36871	1200	56.72911
750	53.80178	1250	57.00456
800	54.19875	1270	57.11339

Таблица 13. . Klemme S. [10]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
400	52.15461	900	58.04313	1400	61.14882
500	54.14096	1000	58.72244	1500	61.71865
600	55.46078	1100	59.36218	1600	62.28074
700	56.4659	1200	59.97497	1700	62.83685
800	57.30328	1300	60.56877	1800	63.38827

Таблица 14. Rimshaw S. J.[11]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
300	44.61435	900	54.8742	1500	58.27959
400	48.74962	1000	55.51938	1600	58.78842
500	50.91516	1100	56.11852	1700	59.29029
600	52.30538	1200	56.68633	1800	59.78671
700	53.32955	1300	57.23205		
800	54.1586	1400	57.76176		

Таблица 15. Gmelin. E. [39]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
4	0.003592	25	1.46	120	29.93	220	41.83
5	0.007551	30	2.751	130	31.55	230	42.33
6	0.01311	40	6.124	140	33.46	240	42.91
6	0.01311	50	9.349	150	35.22	250	43.49
7	0.02249	60	12.64	160	36.41	260	43.91
8	0.0345	70	16.01	170	37.5	270	44.2
9	0.05072	80	19.29	180	38.58	280	44.68
10	0.07008	90	22.11	190	39.49	290	44.98
15	0.2713	100	24.91	200	40.51	300	45.01
20	0.6823	110	27.42	210	41.2		

Таблица 16. Touloukian Y.S. [55]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
57.9	11.61892	138.4	32.32055	279.9	44.43804	1000	55.58007
61.2	12.55971	149.9	34.20646	290.4	44.65482	1100	56.14368
64.3	13.71293	168.8	36.63863	298.4	45.045	1200	56.70728
70	15.55982	185.3	38.46817	405	48.90353	1265	57.09747
76.8	17.64949	207.7	40.34974	500	50.94117		
86.8	20.48485	222.6	41.75008	600	52.32851		
97.1	23.31588	238.3	42.58682	700	53.36901		
111.2	26.96197	254.4	43.4409	800	54.19274		
126.1	30.12249	273.3	44.04786	900	54.92976		

Таблица 17. Rieder K. H. [47].

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
0.035	2.04E-09	50.03	8.593974	99.91	23.85179	149.98	33.72999
5.048	0.00619	55.03	10.22959	104.94	25.1072	154.95	34.43403
10.06	0.05308	60.03	11.90293	109.98	26.30517	159.98	35.11298
14.99	0.215889	65.02	13.56508	114.95	27.42098	165	35.74299
19.97	0.635083	70.01	15.19691	119.99	28.48097	169.97	36.33741
24.97	1.394997	75	16.77942	125.02	29.48164	174.99	36.91117
29.97	2.485253	79.98	18.33072	130.05	30.43524	180.02	37.44678
35	3.834698	84.97	19.79514	134.96	31.32112	185.04	37.95366
39.98	5.329424	90.01	21.22049	139.99	32.17847	189.95	38.4154
44.91	6.907306	95.05	22.58805	144.89	32.96923	194.91	38.86381



Таблица 18. Richard A. Robie [46]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
298.15	45.41	700	53.21	1100	56.89	1500	59.83
400	48.55	800	54.26	1200	57.66	1600	60.52
500	50.52	900	55.2	1300	58.41	1700	61.19
600	52	1000	56.07	1400	59.13	1800	61.85

Таблица 19. Гурвич Л.В. [15]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
100	24.9	800	54.393	1600	60.787	1600	64.772
200	40.41	900	55.387	1700	61.4	1700	65.128
298.15	44.978	1000	56.306	1800	61.979	1800	65.452
300	45.065	1100	57.164	1900	62.524	1900	65.745
400	48.446	1200	57.971	2000	63.038	2000	66.008
500	50.51	1300	58.734	2100	63.519	2100	66.239
600	52.037	1400	59.456	2200	63.968	2200	66.303
700	53.294	1500	60.139	2300	64.386		

Таблица 20. Иргашов Х. [17]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
298.15	45.32	900	45.32	1600	53.78	2300	64.21
300	45.38	1000	45.38	1700	54.03	2400	69.66
400	47.94	1100	47.94	1800	54.42	2500	77.16
500	49.47	1200	49.47	1900	55.05	2600	87.15
600	50.5	1300	50.5	2000	56.1	2700	100.11
700	51.23	1400	51.23	2100	57.79	2800	116.5
800	51.77	1500	51.77	2200	60.38	2805	117.42

Таблица 21. Григорьев И.С [29]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
80	18.2	298.15	45	1000	56.31
150	34.31	400	48.45	1500	60.14
250	43.26	600	52.04		

Таблица 22. Cordfunke E. H. P. [38]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
10	0.06	140	32.34	340	46.31	1100	52.814
20	0.61	160	35.34	350	46.48	1200	52.91
30	2.43	180	37.75	298.15	45.15	1300	53.003
40	5.25	200	39.58	300	45.208	1400	53.139
50	8.52	220	41.16	400	47.686	1500	53.364
60	11.91	240	42.49	500	49.375	1600	53.724
70	15.22	260	43.57	600	50.581	1700	54.264
80	18.38	280	44.48	700	51.44	1800	55.028
90	21.29	298.15	45.15	800	52.034	1900	56.062
100	23.95	300	45.15	900	52.425	2000	57.412
120	28.69	320	45.73	1000	52.669		

Таблица 23. Chase M. W. [36]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
298	45.36	900	55.16	1600	60.53	2300	65.25
300	45.46	1000	56.01	1700	61.23	2400	65.9
400	48.74	1100	56.83	1800	61.92	2500	66.55
500	50.68	1200	57.61	1900	62.59	2600	67.2
600	52.09	1300	58.37	2000	63.26	2700	67.85
700	53.24	1400	59.1	2100	63.93	2800	68.5
800	54.24	1500	59.82	2200	64.59	2900	69.15

Таблица 24. Landolt-Börnstein [45]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
5	0.007551	50	9.349	298.15	45.411
10	0.07008	100	24.91	300	45.01

Таблица 25. Trivedi R. K. [57]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
2.56	0.00107	80.01	19.50132	150.01	35.1378	229.98	42.54696
10	0.073191	90.02	22.52084	160.03	36.50244	240.01	43.08446
19.96	0.686273	100.01	25.31527	169.98	37.69146	250.01	43.56267
30.01	2.535335	110	27.71359	180.01	38.75644	260	43.99037
40.04	5.847174	120	29.93674	190	39.71434	270	44.38932
49.98	9.644487	130.01	31.89211	200	40.55287	280	44.75733
59.99	12.99179	139.99	33.61306	209.99	41.29132	290	45.08056
70.02	16.28523	80.01	19.50132	219.98	41.95466	300.01	45.38929

Таблица 26. Shukla A. [51]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
298	45.11063	700	51.08249	1300	55.31715	1900	59.12074
300	45.17978	800	51.87825	1400	55.96212	2000	59.745
400	47.641	900	52.61686	1500	56.60111		
500	49.11	1000	53.32	1600	57.23556		
600	50.18844	1100	53.99995	1700	57.86651		

## Приложение 5.

Первичные данные КОТР  $\beta(T)$  для SrO. Температура  $T$  дана в К, КОТР  $\beta(T)$  в  $10^{-6} \cdot \text{K}^{-1}$

Таблица 27. Beals R. J. [32]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
293.15	41.16	293.15	40.56	293.15	41.76
433.15	41.16	583.15	40.56	883.15	41.76
573.15	41.16	873.15	40.56	1473.15	41.76

Таблица 28. Ruppin R. [50]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
20.2	0.372	149.8	29.616	400.1	41.046	659.8	42.564
32	2.811	160.1	30.816	420	41.343	680	42.627
40	4.611	180.1	32.928	439.9	41.541	699.8	42.672
51.4	8.016	199.9	34.557	460	41.721	720	42.792
59.8	10.338	219.7	35.685	479.9	41.88	740.2	42.837
70.9	13.551	239.8	36.735	500.1	42	760.1	42.861
79.9	15.738	259.9	37.608	520	42.063	780	42.885
90.4	18.756	280.1	38.406	540.2	42.09	800.2	42.909
99.7	20.826	299.9	39.108	559.7	42.171	880	43.161
110.2	23.052	319.8	39.636	580.3	42.255	960.2	43.317
120.2	24.987	339.9	40.143	599.8	42.336	1040	43.377
131.4	26.982	359.8	40.419	620	42.399	1120.2	43.476
140.1	28.512	379.9	40.809	639.9	42.462	1199.7	43.536

Таблица 29. Григорьев И.С [29]

$T$	$\beta(T)$
300	41.7

Таблица 30. Upadhyay S. P. [58]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
298	41.1	1548	55.5	2174	66.4
1081	49.3	1767	59	2368	70.4
1320	52.3	1975	62.6	2727	79.1

Таблица 31 Landolt-Börnstein [45]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
279	31	809	31	443	41.16
544	31	293	41.16	593	41.16

Таблица 32. Aoumeur-Benkabou F.Z. [31]

$T$	$\beta(T)$
300	29.7

Таблица 33. Aoumeur-Benkabou F.Z. [31]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
300	41.15	300	37	900	64.62
300	42	600	52.26		

Таблица 34. Robert R. Reeber [49]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
25	0.585	400	37.08	850	41.37	1300	44.61
50	4.11	450	37.8	900	41.73	1350	45
100	17.07	500	38.4	950	42.09	1400	45.36
150	25.8	550	38.94	1000	42.45	1450	45.75
200	30.54	600	39.39	1050	42.81	1500	46.14
250	33.27	650	39.84	1100	43.17	1600	46.95
295	34.86	700	40.23	1150	43.53	1700	47.79
300	35.01	750	40.62	1200	43.89	1800	48.66
350	36.21	800	41.01	1250	44.25	1900	49.53

## Приложение 6.

Первичные данные теплоемкости  $C(T)$  для  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ . Температура  $T$  дана в К, теплоёмкость  $C(T)$  в  $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ .

Таблица 35. Burghartz St. [35]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
69,03	9,41	128,84	38,63	187,35	73,10	247,16	102,32
78,55	14,62	138,38	45,85	198,90	77,90	256,67	106,32
90,09	19,01	148,58	51,06	207,07	83,11	267,51	109,10
98,94	24,22	158,11	57,07	217,28	89,53	276,34	113,10
108,46	29,83	167,63	61,88	226,79	93,52	287,17	114,27
118,65	34,23	177,83	67,49	235,61	97,12		

Таблица 36. Chase M.W. [37]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
100	22,67	800	169,47	1600	202,24	2400	231,49
200	78,07	900	174,24	1700	205,96	2408	231,78
289,15	116,20	1000	178,66	1800	209,65	2500	235,10
300	116,53	1100	182,85	1900	213,33	2600	238,70
400	137,99	1200	186,90	2000	216,98	2700	242,29
500	149,83	1300	190,83	2100	220,62	2800	245,89
600	157,89	1400	194,69	2200	224,25		
700	164,16	1500	198,49	2300	227,88		

Таблица 37. Klemme S. [42] часть 1

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
4,33	0,006	8,03	0,014	13,8	0,066	23,6	0,33	41,6	1,89	64,3	7,17
4,39	0,006	8,15	0,015	14	0,068	24,1	0,35	42,1	1,96	65,3	7,52
4,46	0,006	8,29	0,015	14,2	0,070	24,6	0,37	42,6	2,04	66,3	7,86
4,54	0,006	8,41	0,016	14,3	0,072	25,1	0,39	43,1	2,11	67,3	8,18
4,62	0,007	8,54	0,017	14,5	0,074	25,6	0,42	43,6	2,19	68,3	8,53
4,68	0,006	8,68	0,017	14,6	0,077	26,1	0,44	44,1	2,27	69,3	8,92
4,75	0,006	8,81	0,018	14,8	0,079	26,6	0,47	44,6	2,36	70,3	9,27
4,84	0,006	8,94	0,019	14,9	0,077	27,1	0,49	45,1	2,43	71,3	9,66
4,91	0,007	9,07	0,020	15	0,088	27,6	0,52	45,6	2,53	72,3	10,00
5,01	0,005	9,22	0,021	15,2	0,083	28,1	0,55	46,1	2,59	73,3	10,40
5,11	0,006	9,35	0,021	15,3	0,093	28,6	0,58	46,6	2,69	74,3	10,80
5,19	0,006	9,47	0,022	15,5	0,091	29,1	0,61	47,1	2,79	75,3	11,20
5,29	0,006	9,57	0,022	15,6	0,098	29,6	0,65	47,6	2,87	76,3	11,60
5,39	0,007	9,72	0,024	15,8	0,096	30,1	0,68	48,1	2,97	77,3	12,00
5,48	0,007	9,93	0,026	15,9	0,103	30,6	0,72	48,6	3,07	78,3	12,50
5,58	0,007	10,1	0,027	16	0,105	31,1	0,75	49,1	3,17	79,3	12,90
5,68	0,007	10,3	0,028	16,1	0,109	31,6	0,79	49,6	3,27	80,3	13,30
5,78	0,007	10,4	0,030	16,4	0,107	32,1	0,84	50,1	3,38	81,3	13,80
5,87	0,007	10,6	0,031	16,5	0,110	32,6	0,88	50,6	3,48	82,3	14,20
5,98	0,007	10,8	0,033	16,8	0,118	33,1	0,92	51,1	3,58	83,3	14,70
6,08	0,008	11	0,035	17,2	0,125	33,6	0,97	51,6	3,71	84,3	15,10
6,18	0,009	11,1	0,036	17,5	0,132	34,1	1,01	52,1	3,82	85,3	15,60
6,3	0,009	11,3	0,037	17,9	0,14	34,6	1,05	52,6	3,90	86,3	16,00
6,41	0,009	11,5	0,039	18,2	0,15	35,1	1,10	53,1	4,05	87,3	16,50
6,51	0,010	11,7	0,041	18,6	0,16	35,6	1,15	53,6	4,14	88,3	17,00
6,69	0,009	11,9	0,043	19	0,17	36,1	1,20	54,1	4,47	89,3	17,50
6,81	0,009	12,1	0,045	19,3	0,18	36,6	1,26	54,6	4,39	90,3	17,90
6,92	0,010	12,2	0,046	19,7	0,19	37,1	1,32	55,4	4,58	91,3	18,40
7,04	0,010	12,4	0,048	20,1	0,20	37,6	1,37	56,3	4,83	92,3	18,50
7,16	0,011	12,6	0,050	20,5	0,21	38,1	1,43	57,3	5,10	93,3	19,20
7,28	0,011	12,8	0,052	21	0,23	38,6	1,49	58,3	5,36	94,3	19,80
7,41	0,012	13	0,054	21,4	0,24	39,1	1,55	59,3	5,64	95,3	20,40
7,53	0,011	13,1	0,056	21,8	0,26	39,6	1,62	60,3	5,95	96,2	20,80
7,65	0,013	13,3	0,059	22,2	0,27	40,1	1,69	61,3	6,25	97,3	21,40
7,78	0,013	13,5	0,061	22,7	0,29	40,6	1,75	62,3	6,54	98,2	21,90
7,91	0,013	13,7	0,063	23,2	0,31	41,1	1,81	63,3	6,86	99,3	22,40

Таблица 38. Klemme S. [42] часть 2

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
100,3	22,80	136,4	43,00	172,2	63,70	207,9	82,40	243,5	99,20	278,8	112,50
101,6	23,20	137,4	43,60	173,2	64,30	208,9	83,30	244,5	99,40	279,8	112,50
102,6	23,70	138,4	44,10	174,2	64,80	209,9	83,70	245,4	99,70	280,8	113,70
103,6	24,30	139,4	44,70	175,2	65,40	210,9	83,90	246,4	100,80	281,8	112,80
104,6	24,80	140,4	45,30	176,2	65,90	211,9	84,80	247,4	100,60	282,7	113,70
105,6	25,30	141,4	45,90	177,2	66,40	212,9	84,90	248,4	100,90	283,7	114,20
106,6	25,90	142,4	46,50	178,2	67,00	213,8	85,70	249,4	100,40	284,7	114,50
107,6	26,40	143,3	47,10	179,1	67,40	214,8	86,00	250,4	101,60	285,7	114,00
108,5	27,00	144,3	47,60	180,1	68,20	215,8	86,80	251,3	102,20	286,7	115,30
109,5	27,50	145,3	48,20	181,1	68,70	216,8	87,10	252,3	102,80	287,6	116,20
110,5	28,10	146,3	48,70	182,1	69,10	217,8	87,30	253,3	101,60	288,6	116,40
111,5	28,70	147,3	49,40	183,1	69,70	218,8	88,10	254,3	103,30	289,6	116,20
112,5	29,20	148,3	50,00	184,1	70,20	219,8	88,60	255,3	103,80	290,6	117,40
113,5	29,70	149,3	50,60	185,1	70,90	220,8	89,00	256,3	104,10	291,5	117,10
114,5	30,30	150,3	51,20	186,1	71,40	221,8	89,60	257,2	104,30	292,5	118,00
115,5	30,90	151,3	51,80	187,1	71,90	222,7	89,70	258,2	105,50	293,5	118,30
116,5	31,50	152,3	52,40	188,1	72,40	223,7	90,60	259,2	106,00	294,5	118,20
117,5	32,00	153,3	52,80	189,1	72,70	224,7	90,90	260,2	107,10	295,4	118,70
118,5	32,60	154,3	53,40	190,1	73,50	225,7	91,50	261,2	107,50	296,4	119,80
119,5	33,20	155,3	54,10	191,1	73,50	226,7	91,70	262,2	106,10	297,4	120,00
120,5	33,70	156,3	54,70	192	74,50	227,7	92,40	263,1	106,90	298,4	120,30
121,5	34,30	157,3	55,10	193	74,90	228,7	92,50	264,1	107,10	299,3	120,30
122,5	34,90	158,2	55,80	194	75,40	229,7	93,40	265,1	107,80	300,3	120,80
123,5	35,50	159,2	56,00	195	76,00	230,6	93,70	266,1	107,70	301,3	121,80
124,5	36,00	160,2	56,90	196	76,30	231,6	94,20	267,1	107,70	302,3	121,80
125,5	36,60	161,3	57,40	197	77,20	232,6	94,40	268	108,60	303,2	121,50
126,4	37,20	162,2	58,00	198	77,50	233,6	95,20	269	109,10	304,2	121,90
127,4	37,80	163,2	58,70	199	78,00	234,6	94,80	270	109,60	305,2	123,90
128,4	38,40	164,2	59,10	200	78,60	235,6	95,60	271	109,40		
129,4	39,00	165,2	59,80	201	79,10	236,6	96,90	272	109,30		
130,4	39,50	166,2	60,30	202	79,80	237,6	96,40	272,9	110,20		
131,4	40,10	167,2	60,90	203	80,40	238,5	96,70	273,9	110,20		
132,4	40,70	168,2	61,30	203,9	80,50	239,5	97,40	274,9	110,20		
133,4	41,20	169,2	62,00	204,9	81,20	240,5	97,80	275,9	111,20		
134,4	41,80	170,2	62,50	205,9	81,80	241,5	97,70	276,9	111,50		
135,4	42,40	171,2	63,00	206,9	82,30	242,5	98,80	277,8	112,20		



## Приложение 7.

Первичные данные КОТР  $\beta(T)$  для  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ . Температура  $T$  дана в К, КОТР  $\beta(T)$  в  $10^{-6} \cdot \text{K}^{-1}$

Таблица 39. Князев А.В. [19]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
298	19,2	573	23,1	873	27,6
373	20,4	673	24,6	973	29,1
473	21,9	773	26,1	1073	30,6

Таблица 40. Simon A.T. [52]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
299	20,81	1035	26,68	1481	30,18
683	23,88	1100	27,19	1544	30,67
707	24,08	1164	27,69	1606	31,15
766	24,54	1228	28,20	1644	31,44
837	25,11	1291	28,69	1662	31,58
903	25,63	1355	29,19		
969	26,15	1418	29,68		

Таблица 41. Simon A.T. [52]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
298	20,767	973	25,643	1473	29,201
473	22,039	1073	26,359	1573	29,907
673	23,486	1173	27,072	1673	30,610
773	24,207	1273	27,784	1773	31,311
873	24,926	1373	28,494	1873	32,010

Таблица 42. Grimes N. W. [40]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
77,5	2,7	150	6,45	220,1	11,16
89,6	3,27	160	7,05	230,3	11,94
99,6	3,72	171,1	7,74	240	12,69
110,3	4,26	180,9	8,4	250	13,5
120	4,77	189,8	9	259,6	14,28
130	5,31	199,8	9,69	270,1	15,18
140	5,85	210,3	10,44	300,1	17,85

## Приложение 8.

Первичные данные теплоемкости  $C(T)$  для ВаО. Температура  $T$  дана в К, теплоёмкость  $C(T)$  в  $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ .

Таблица 43. Travis C. A [56]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
56.1	18.68993	109.1	33.79835	207.1	44.1412	259.4	46.48424
59.2	19.92002	120.6	35.94474	230.1	44.978	274.3	46.31688
72.1	24.67305	136.6	38.21666	230.5	45.6056	287.6	46.81896
97	31.2503	156.2	40.56388	244.2	46.2332	298.6	46.48424
101.5	32.25864	166.8	41.5262	250.1	46.19136		
102.8	32.56407	190.2	43.26256	255.7	46.35872		

Таблица 44. Lander J. J. [44]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
390	49.54356	600	53.60913	850	55.85388	1100	57.40462
400	49.85654	650	54.1678	900	56.19556	1150	57.68054
450	51.16299	700	54.65602	950	56.51817	1200	57.94933
500	52.15942	750	55.09194	1000	56.82541	1250	58.21209
550	52.95326	800	55.48821	1050	57.12016	1270	58.31572

Таблица 45. Kelley K.K. [41]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
400	50.17453	800	55.0468	1200	58.51278	1600	61.77101
500	51.78955	900	55.95413	1300	59.33719	1700	62.57402
600	53.02616	1000	56.82709	1400	60.15379	1800	63.37438
700	54.08409	1100	57.67758	1500	60.9646	1900	64.17262

Таблица 46. Gmelin. E. [39]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
4	0.01936	25	6.89	120	35.68	220	44.6
5	0.0416	30	9.098	130	35.98	230	44.92
6	0.07	40	12.83	140	38.61	240	45.18
6	0.07	50	16.69	150	39.75	250	45.46
7	0.1223	60	20.31	160	40.7	260	45.71
8	0.1934	70	23.85	170	41.49	270	46.01
9	0.2876	80	27.03	180	42.22	280	46.33
10	0.4171	90	29.65	190	42.85	290	46.69
15	1.904	100	31.88	200	43.55	300	47.5
20	4.5	110	33.99	210	44.1		

Таблица 47. Touloukian Y.S. [55]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
56.1	18.68253	136.6	38.21193	250.1	46.18665	500	52.15326
59.2	19.91434	156.2	40.56008	255.7	46.35346	600	53.6032
72.1	24.66838	166.8	41.51602	259.4	46.47536	700	54.64896
97	31.24448	190.2	43.25467	274.3	46.30855	800	55.48301
101.5	32.25174	207.1	44.13363	287.6	46.80897	900	56.18873
102.8	32.5597	230.1	44.97408	298.6	46.47536	1000	56.81747
109.1	33.79151	230.5	45.59641	390	49.53565	1100	57.39489
120.6	35.94077	244.2	46.22515	400	49.85002	1200	57.94022

Таблица 48. Richard A. Robie [46]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
298.15	47.28	900	56.28	1500	60.89
400	49.98	1000	57.15	1600	61.58
500	51.78	1100	57.96	1700	62.24
600	53.17	1200	58.73	1800	62.9
700	54.33	1300	59.47		
800	55.36	1400	60.19		

Таблица 49. Гурвич Л.В. [15]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
100	31.88	800	55.397	1600	61.076
200	43.48	900	56.323	1700	61.558
298.15	46.986	1000	57.171	1800	61.996
300	47.059	1100	57.954	1900	62.391
400	49.96	1200	58.679	2000	62.742
500	51.801	1300	59.351	2100	63.049
600	53.201	1400	59.973	2200	63.314
700	54.37	1500	60.548	2290	63.516

Таблица 50. Иргашов Х. [17]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
298.15	46.906	800	51.871	1400	53.649	2000	90.372
300	46.955	900	52.199	1500	54.603	2100	111.649
400	48.921	1000	52.462	1600	56.484	2200	141.09
500	50.101	1100	52.684	1700	59.968		
600	50.888	1200	52.928	1800	65.972		
700	51.45	1300	53.172	1900	75.652		

Таблица 51. Stull D. R. [54]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
298.15	43.75052	800	54.9058	1400	60.02111	2000	64.1981
300	43.85354	900	55.92697	1500	60.74487	2100	64.87075
400	47.98781	1000	56.84913	1600	61.45368	2200	65.5404
500	50.52869	1100	57.70287	1700	62.15105		
600	52.33079	1200	58.50796	1800	62.83964		
700	53.73581	1300	59.27765	1900	63.52147		

Таблица 52. Cordfunke E. [38]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
10	0.27	140	38.58	340	47.89	1300	54.834
20	2.68	160	40.66	350	47.97	1400	54.904
30	6.8	180	42.24	400	49.239	1500	54.987
40	11.77	200	43.48	500	50.801	1600	55.116
50	16.23	220	44.57	600	51.99	1700	55.322
60	20.29	240	45.4	700	52.894	1800	55.363
70	23.86	260	46.06	800	53.568	1900	56.09
80	27.02	280	46.64	900	54.054	2000	56.715
90	29.68	298.15	47.06	1000	54.39		
100	32.01	300	47.14	1100	54.61		
120	35.84	320	47.48	1200	54.747		

Таблица 53. Григорьев И.С. [29]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
80	26.78	298.15	47	1000	57.17
150	39.66	400	49.96	1500	60.55
250	46.02	600	53.2	1000	57.17

Таблица 54. Chase M. W. [36]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
100	31.941	600	53.22	1200	58.706	1800	62.927
200	43.493	700	54.396	1300	59.442	1900	63.605
298.15	47.279	800	55.405	1400	60.162	2000	64.275
300	47.329	900	56.312	1500	60.869	2100	64.94
400	49.898	1000	57.153	1600	61.563	2200	65.605
500	51.785	1100	57.948	1700	62.25	2286	66.177

Таблица 55. Landolt-Börnstein [45]

$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$	$T$	$C(T)$
5	0.0416	50	16.69	298.15	47.278
10	0.4171	100	31.88	300	47.5

## Приложение 9.

Первичные данные КОТР  $\beta(T)$  для ВаО. Температура  $T$  дана в К, КОТР  $\beta(T)$  в  $10^{-6} \cdot \text{К}^{-1}$ .

Таблица 56. Kwang-Oh P. [43]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
9.25	1.221	38.95	10.254	109.41	28.989	219.78	37.446
13.49	2.115	49.15	13.617	119.17	30.312	239.58	38.448
16.29	2.667	59.45	23.157	123.74	31.029	250.23	38.619
19.02	4.671	63.98	18.753	139.34	32.526	260.34	39.222
21.77	3.981	69.67	20.067	148.5	33.357	274.84	39.735
24.25	4.698	79.17	22.635	159.33	34.113	283.18	39.999
27.75	5.742	89.3	25.353	179.54	35.472	293.72	40.317
28.76	6.639	99.03	27.411	199.87	36.474	301.03	40.386

Таблица 57. Upadhyay S. P. [58]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
298	38.4	1097	46.2	1798	55.4
576	40.8	1341	49.1	2012	56.8
842	43.4	1575	52.1	2200	58.6

Таблица 58. Robert R. Reeber [49]

$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$	$T$	$\beta(T)$
25	4.83	400	42.33	850	50.79	1300	61.74
50	14.01	450	43.29	900	51.81	1350	63.27
100	27	500	44.22	950	52.89	1400	64.86
150	33.27	550	45.15	1000	54	1450	66.54
200	36.51	600	46.05	1050	55.14	1500	68.34
250	38.55	650	46.95	1100	56.34	1600	72.21
295	39.93	700	47.88	1150	57.6	1700	76.62
300	40.08	750	48.81	1200	58.92	1800	81.6
350	41.28	800	49.77	1250	60.3	1900	87.33